

Titre: Modélisation du procédé de malaxage tripale à mouvement
planétaire par une nouvelle approche des domaines fictifs

Auteur: Benjamin Coesnon

Date: 2007

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Coesnon, B. (2007). Modélisation du procédé de malaxage tripale à mouvement
planétaire par une nouvelle approche des domaines fictifs [Master's thesis, École
Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/8038/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/8038/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:**
Advisors:

Programme: Unspecified
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION DU PROCÉDÉ DE MALAXAGE TRIPALE À MOUVEMENT
PLANÉTAIRE PAR UNE NOUVELLE APPROCHE DES DOMAINES FICTIFS

BENJAMIN COESNON
DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE CHIMIQUE)

JUIN 2007

© Benjamin Coesnon, 2007



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 978-0-494-35671-5

Our file Notre référence

ISBN: 978-0-494-35671-5

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.


Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

MODÉLISATION DU PROCÉDÉ DE MALAXAGE TRIPALE À MOUVEMENT
PLANÉTAIRE PAR UNE NOUVELLE APPROCHE DES DOMAINES FICTIFS

présenté par : COESNON Benjamin

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. PERRIER Michel, Ph.D., président

M. BERTRAND François, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. TANGUY Philippe, Ph.D., membre et co-directeur de recherche

M. SRINIVASAN Bala, Ph.D., membre

À Sothavie pour son soutien et sa compréhension,

REMERCIEMENTS

J'aimerais tout d'abord remercier mon directeur de recherche, Monsieur François Bertrand et mon co-directeur de recherche, Monsieur Philippe Tanguy, pour la confiance qu'ils m'ont accordée en m'accueillant au sein de leur unité de recherche et pour le soutien financier qu'ils m'ont apporté.

Je remercie Mourad Heniche pour les inestimables conseils et les relectures qu'il m'a apportés et Christophe Devals pour son aide sur le projet.

Je pense bien évidemment à Marlène et Josiane toujours de bonne humeur et prêtes à me rendre service.

Je remercie enfin Grégoire Pianet, François Cabaret, Avinash Khopkar, Matthieu Lelièvre et Florent Champet sans lesquels l'ambiance à l'URPEI n'aurait pas été ce qu'elle était : chaleureuse et stimulante.

RÉSUMÉ

Le propergol est un matériau énergétique qui joue un rôle majeur dans de nombreuses industries, notamment aérospatiale (propulsion solide, stratégique ou tactique) et automobile (générateurs pyrotechniques pour coussins gonflables). Son procédé de fabrication se décompose en plusieurs étapes. L'une d'entre elles constitue l'objet de cette étude. Il s'agit du malaxage. Cette opération consiste à réaliser un mélange homogène entre des matières premières, pulvérulentes et liquides (charges énergétiques et liants, par exemple). Elle est réalisée par agitation mécanique. En particulier, celle-ci peut être effectuée en utilisant des mélangeurs planétaires. L'étude des capacités de mélange de ce système par le biais de grandeurs macroscopiques comme la puissance d'agitation ou le temps de mélange s'avère extrêmement coûteuse (consommation de puissance et coût de fabrication très élevés, procédures d'utilisation qui ralentissent l'étude). La modélisation tridimensionnelle de ce procédé permet de contourner ces difficultés. La géométrie de ce mélangeur est cependant si complexe que la plupart des méthodes existantes ne semblent pas adaptées (temps de calcul trop longs, précision inacceptable ou mouvement des objets mobiles trop complexes à décrire). L'objectif de cette recherche est de présenter une méthode originale qui permet de modéliser numériquement le procédé de malaxage du propergol dans des délais acceptables, tout en obtenant des résultats exploitables à des fins industrielles.

ABSTRACT

Propellants are thermoset composite materials that are commonly used in many industries such as aerospace and automobile. Their manufacturing process is composed of several unit operations. One of them, namely the kneading step, is the object of this study. This operation consists in blending homogeneously very fine solids at high loading rates in a viscous polymeric matrix. The procedure is commonly achieved by mechanical agitation, using vertical planetary kneaders, more particularly three-blade planetary mixers. It is known that the investigation of mixer performance through the evaluation of macroscopic quantities such as mixing time or power draw is a time-consuming and expensive task. 3D CFD simulation may then appear as a useful tool for the design of an efficient mixing process. However, the geometrical complexity of planetary mixers is such that standard CFD methods are inappropriate for the task (too long computing times, unacceptable precision or movement of the mobile objects too complex to describe). The objective of this research is to present an original method that allows the numerical modelling of the kneading process of propellants within acceptable times, while obtaining useable results from an industrial point of view.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	IV
REMERCIEMENTS.....	V
RÉSUMÉ	VI
ABSTRACT	VII
TABLE DES MATIÈRES	VIII
LISTE DES FIGURES.....	XI
NOMENCLATURE	XIII
CHAPITRE 1 INTRODUCTION.....	1
1.1 LE PROPERGOL, UN MATÉRIAU ÉNERGÉTIQUE	1
1.2 PROCÉDÉ DE MALAXAGE EN MILIEUX PÂTEUX	4
1.3 PROBLÉMATIQUE.....	9
1.4 OBJECTIF GÉNÉRAL.....	10
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	11
2.1 CONCEPTION DES SYSTÈMES DE MÉLANGE.....	11
2.1.1 <i>Introduction</i>	11
2.1.2 <i>Principe de similitude</i>	11
2.1.3 <i>Caractérisation de l'écoulement d'un fluide</i>	12
2.1.4 <i>Consommation de puissance</i>	13
2.1.5 <i>Temps de mélange</i>	16
2.1.6 <i>Choix des grandeurs caractéristiques</i>	18
2.2 MODÉLISATION NUMÉRIQUE POUR L'ÉCOULEMENT DE FLUIDES VISQUEUX DANS DES DOMAINES CONTENANT DES OBJETS INTERNES MOBILES	19
2.2.1 <i>Méthodes des frontières immergées (immersed boundary methods)</i>	20
2.2.2 <i>Méthodes des domaines fictifs (fictitious domain methods)</i>	23
2.2.3 <i>Autres méthodes</i>	27
CHAPITRE 3 OBJECTIFS SPÉCIFIQUES	31
CHAPITRE 4 MÉTHODOLOGIE	33
4.1 INTRODUCTION.....	33
4.2 ÉQUATIONS D'ÉCHANGE	33
4.3 MÉTHODE DES DOMAINES FICTIFS PAR LAGRANGIEN.....	35

4.3.1	<i>Introduction</i>	35
4.3.2	<i>Traitement de la contrainte d'incompressibilité</i>	35
4.3.3	<i>Traitement des contraintes cinématiques</i>	37
4.4	DISCRÉTISATION : LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS VIRTUELS	40
4.4.1	<i>Introduction</i>	40
4.4.2	<i>Approximation du champ des vitesses et de la pression</i>	40
4.4.3	<i>Approximation des multiplicateurs de Lagrange pour les contraintes cinématiques</i>	46
4.5	STRATÉGIES DE RÉOLUTION.....	48
4.5.1	<i>Introduction</i>	48
4.5.2	<i>Approche découplée : méthode de pénalisation consistante pour (u,p)....</i>	48
4.5.2.1	Méthode de pénalisation consistante pour (v, p)	49
4.5.2.2	Mise à jour des multiplicateurs de Lagrange de façon découplée	52
4.5.3	<i>Approche totalement couplée en (u, p, λ)</i>	54
CHAPITRE 5 MODÉLISATION NUMÉRIQUE DU PROCÉDÉ DE MALAXAGE TRIPALE À MOUVEMENT PLANÉTAIRE PAR UNE APPROCHE DES DOMAINES FICTIFS		59
5.1	PRÉSENTATION DE L'ARTICLE	59
5.2	A FAST AND ROBUST FICTITIOUS DOMAIN METHOD FOR MODELLING VISCOUS FLOWS IN COMPLEX MIXERS	60
5.2.1	<i>Summary</i>	61
5.2.2	<i>Introduction</i>	61
5.2.3	<i>Equations of change</i>	65
5.2.4	<i>Numerical strategy</i>	67
5.2.4.1	Decoupled approach.....	69
5.2.4.2	Fully coupled approach	71
5.2.5	<i>Mixing characterisation</i>	72
5.2.6	<i>Accuracy of the MINI-based VFEM</i>	74
5.2.7	<i>Industrial flow in a three-blade planetary mixer</i>	84
5.2.8	<i>Conclusions</i>	99
5.2.9	<i>Acknowledgements</i>	100
CHAPITRE 6 RÉSULTATS ADDITIONNELS ET DISCUSSION GÉNÉRALE		101
CHAPITRE 7 CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS.....		110
RÉFÉRENCES.....		113

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1-1- Propriétés physiques du propergol considéré dans cette étude.....	2
Tableau 4-1 – Fonctions de base de l'élément P_1^+ - P_1 (MINI).....	46
Tableau 5-1 - Dimensions of the Maxblend impeller	75
Tableau 5-2 - Characteristics of the meshes generated for the Maxblend impeller system in an unbaffled configuration.....	78
Tableau 5-3 – Simulations results for the Maxblend impeller in an unbaffled configuration.....	80
Tableau 5-4 - Simulation results for the Maxblend impeller system a baffled configuration.....	82
Tableau 5-5 - Characteristics of the meshes generated for the three-blade planetary mixer	89
Tableau 5-6- Average CPU time for the three-blade planetary mixer	98
Tableau 6-1 - Données caractéristiques pour la simulation de l'écoulement en filière	106

LISTE DES FIGURES

Figure 1-1 - Exemple de procédé de fabrication d'un propergol solide (réf. <i>SNPE ME</i> document interne)	3
Figure 1-2 - Mécanisme de malaxage en régime laminaire	4
Figure 1-3 - Agitateurs raclants	6
Figure 1-4 - Exemples de malaxeurs horizontaux	7
Figure 1-5 - Exemples de malaxeurs planétaires	7
Figure 1-6 - (a) Bivis d'extrusion, (b) éléments de vis	8
Figure 1-7 - Malaxeur tripale à mouvement planétaire (<i>SNPE, CNES</i>).....	9
Figure 2-1 - Chicanes montées sur une cuve.....	16
Figure 2-2 - Élément fini $P_1^+ - P_0$	26
Figure 4-1 – Domaine fluide contenant un objet interne	38
Figure 4-2 - Élément fini $P_1^+ - P_0$	42
Figure 4-3 – Élément fini $P_1^+ - P_1$ (MINI)	43
Figure 4-4 – Algorithme de résolution pour la méthode des éléments finis virtuels de façon découplée	53
Figure 4-5 – Nouvel algorithme de résolution de la méthode des éléments finis virtuels	58
Figure 5-1 – Computational domain Ω with an internal part Ω^* of boundary Γ^*	67
Figure 5-2 – Solution algorithm for the virtual finite element method and the decoupled approach	70
Figure 5-3 – Solution algorithm for the virtual finite element method and the fully coupled approach	72
Figure 5-4 - Schematic of the Maxblend impeller in a baffled configuration.....	75
Figure 5-5 - Mesh of the Maxblend in an unbaffled configuration	77

Figure 5-6 - Numerical and experimental power curves for the Maxblend impeller in an unbaffled configuration	79
Figure 5-7 - Mesh of the Maxblend impeller in a baffled configuration	82
Figure 5-8 - Numerical and experimental power curves for the Maxblend impeller in a baffled configuration.....	83
Figure 5-9 - (a) Three-blade planetary mixer with the blades on off-centered shafts and a central wheel shaft (adapted from Kol'man-Ivanov and Shklovskaya, 1966), (b) Motion of the blades	85
Figure 5-10 – Top view of the central impeller and one of the two external impellers (adapted from Kol'man-Ivanov and Shklovskaya, 1966)	86
Figure 5-11 - Mesh for the three-blade planetary mixer	88
Figure 5-12 - Norm of the velocity field at the 3rd time step in three different cross sections	91
Figure 5-13 – Axial component of the velocity field at the 3rd time step on the mid-height cross section	92
Figure 5-14 - Norm of the velocity field at the 7th time step on three different cross sections	93
Figure 5-15 - Axial component of the velocity field at the 7th time step on the mid-height cross section	94
Figure 5-16 – Shear stress on the mid-height cross section after the 3rd time step	96
Figure 5-17 - Shear stress on the mid-height cross section after the 7th time step	97
Figure 5-18 - Power consumption of the three-blade planetary mixer	98
Figure 6-1- Filière à propergol à 4 sorties.....	102
Figure 6-2 - Évolution de l'erreur relative en débit et de la perte de charge en fonction de ε_p	105
Figure 6-3 - Profil de vitesse dans la filière pour différents α	107
Figure 6-4 - Profil de vitesse pour le montage filière à 4 sorties ($\alpha = 16$).....	108
Figure 6-5 - Profil de pression pour le montage filière à 4 sorties ($\alpha = 16$)	109

NOMENCLATURE

Symbole	Description	Unité
A	Matrice de diffusion	$(-)$
B	Matrice divergence	$(-)$
D	Diamètre de l'agitateur	(m)
f	Force externe dans les équations de Navier-Stokes	(N)
h	Taille de maille	(m)
H	Hauteur de la cuve	(m)
L	Lagrangien pour le problème de Stokes	$(-)$
n	Indice de loi de puissance	$(-)$
N	Vitesse d'agitation	$(tours$ $par\ seconde)$
p	Pression	(Pa)
P	Vecteur contenant la pression	$(-)$
P	Puissance	(W)
r	Paramètre de pénalisation dans le lagrangien augmenté	$(-)$
R	Rayon de la cuve	(m)
R	Résidu dans l'algorithme de résolution	$(-)$

s	Paramètre de pénalisation dans le lagrangien augmenté	(-)
t	Temps	(s)
\mathbf{U}	Vecteur contenant le champ de vitesse	(-)
\mathbf{v}, \mathbf{u}	Vitesse	($m.s^{-1}$)
V	Volume	(m^3)
*	Référence à une quantité virtuelle	(-)

SYMBOLES GRECS :

Symbole	Description	Unité
α	Indice de pénalisation en pression	(-)
β	Indice de pénalisation en multiplicateurs de Lagrange	(-)
δ	Fonction de Dirac	(-)
ε_p	Paramètre de pénalisation pour la méthode de la pénalisation en pression	(-)
ε_λ	Paramètre de pénalisation pour la méthode de la pénalisation en multiplicateurs de Lagrange	(-)
$\dot{\gamma}$	Tenseur des vitesses de cisaillement	(s^{-1})
$\dot{\gamma}_a$	Taux de cisaillement apparent	(s^{-1})
Γ	Frontière du domaine d'écoulement	(-)
η	Viscosité apparente	(Pa.s)

κ	Paramètre de mise à l'échelle en pression	(-)
λ	Multiplicateur de Lagrange dans la formulation variationnelle de la méthode du domaine fictif	(-)
Λ	Vecteur contenant les multiplicateurs de Lagrange dans la méthode du domaine fictif	(-)
μ	Viscosité newtonienne	(Pa.s)
ρ	Masse volumique	(kg / m ³)
τ	Tenseur des contraintes	(Pa)
Ω	Domaine d'écoulement	(-)
ω	Vitesse angulaire	(rad.s ⁻¹)
ψ	Fonction test pour la vitesse	(-)
φ	Fonction de base	(-)
ϕ	Fonction test pour la pression	(-)
ξ	Fonction test pour la méthode du domaine fictif	(-)

NOMBRES SANS DIMENSION :

Symbole	Description	Unité
K_p	Constante de puissance d'agitation (fluide newtonien)	(-)
N_p	Nombre de puissance	(-)
R_e	Nombre de Reynolds	(-)

ABRÉVIATIONS:

<i>CFD</i>	Computational Fluid Dynamics	(-)
<i>CPU</i>	Central Processing Unit	(-)
<i>SNPE</i>	Société Nationale des Poudres et des Explosifs	(-)
<i>ME</i>	Matériaux Énergétiques	(-)
<i>CNES</i>	Centre National d'Études spatiales	(-)

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

1.1 Le propergol, un matériau énergétique

Le propergol est un combustible à haute valeur énergétique qui appartient à la classe des matériaux énergétiques. La combustion de ces matériaux par couches parallèles (grossièrement à la manière d'une cigarette) dégage un volume important de gaz en un temps très court, de l'ordre du dixième de seconde. Dans le domaine de la propulsion spatiale, par exemple, les gaz dégagés passent par une tuyère et génèrent une force de poussée qui fait décoller la fusée du sol.

Les propergols peuvent se présenter sous des formes physiques variées : solides, pulvérulents, gels ou liquides. La forme solide est la plus couramment utilisée. Elle est en effet plus facilement stockable et génère des poussées plus importantes. Sa composition est typiquement de 86% de charges énergétiques (68% de perchlorate d'ammonium et d'oxyde de fer, 18% d'aluminium) et de 14% de liant (10% de polybutadiène hydroxytéléchélique et 4% d'additifs). L'oxyde de fer est un catalyseur qui conditionne en grande partie les propriétés balistiques des chargements. Ce mélange d'éléments pulvérulents dans un polymère visqueux donne au propergol la forme d'une pâte extrêmement visqueuse lors de sa réalisation. Puis, par réticulation en température, il devient solide.

La Figure 1-1 présente un exemple de procédé de fabrication d'un propergol solide utilisé en propulsion spatiale. Pour ce type de combustible, le matériau est

préparé par malaxage, puis coulé à l'état de pâte dans un réservoir avant d'être polymérisé en étuve pour finalement être assemblé au moteur. L'objet de cette étude porte sur la phase de malaxage.

Les propergols ont généralement une viscosité définie par une loi de puissance, en [1-1]. Toutefois, la composition utilisée dans cette étude présente un indice de rhéologie proche de 0,9. Le propergol peut donc être approché par un fluide newtonien.

$$\eta = \mu \dot{\gamma}^{n-1} \quad [1-1]$$

Le Tableau 1-1 reprend les caractéristiques de la pâte qui sera analysée dans cette étude.

Tableau 1-1- Propriétés physiques du propergol considéré dans cette étude

Masse volumique (kg.m ⁻³)	Viscosité newtonienne (Pa.s)	Capacité calorifique (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	Conductivité thermique (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)
1800	400	1200	0,69

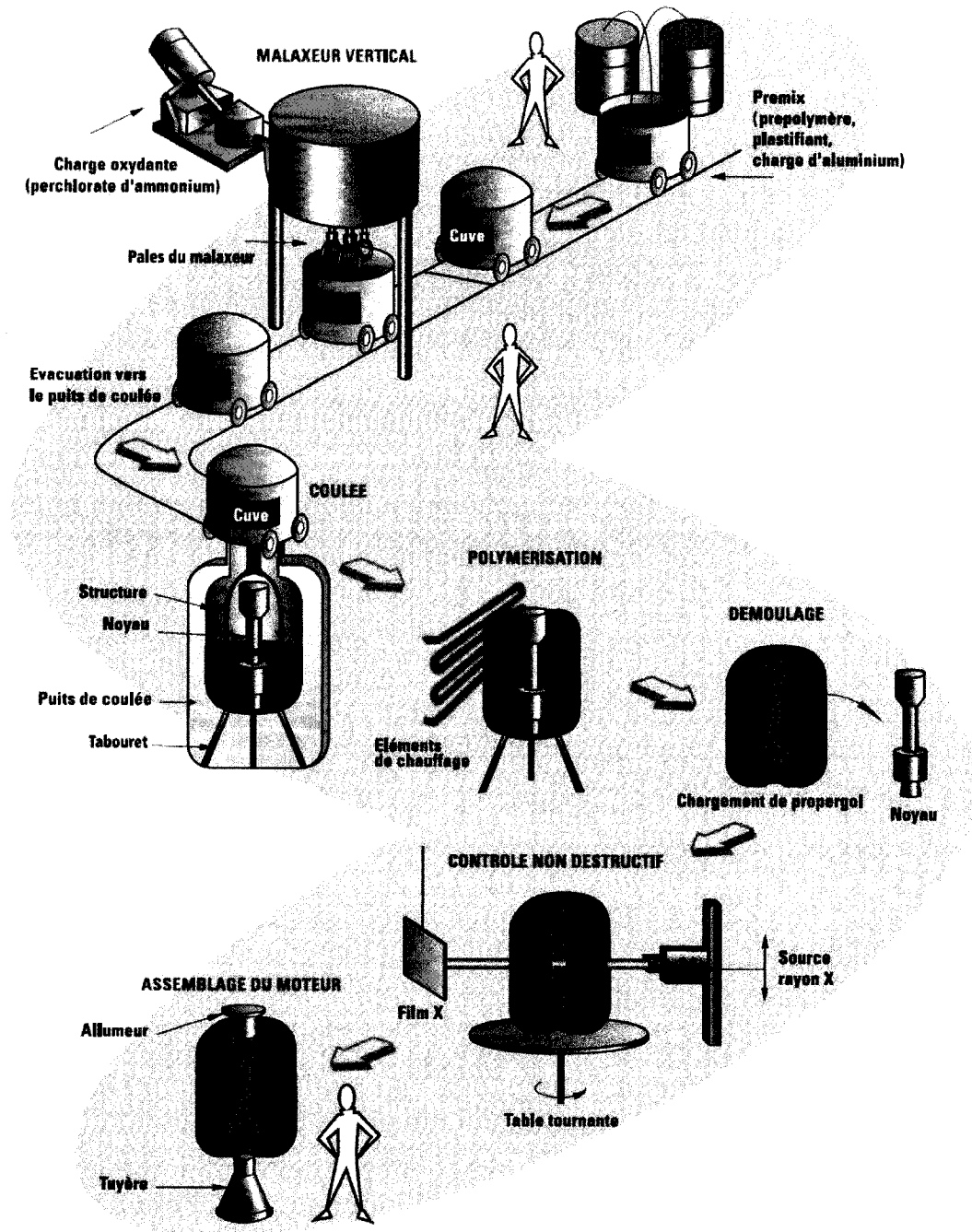


Figure 1-1 - Exemple de procédé de fabrication d'un propergol solide (réf. *SNPE ME* document interne)

1.2 Procédé de malaxage en milieux pâteux

Le malaxage du propergol est une étape très importante dans le procédé industriel de fabrication du matériau. Cette opération détermine en effet ses propriétés mécaniques et énergétiques. Elle consiste à incorporer à une matrice polymère des particules de perchlorates en grande quantité. Ce procédé explique en partie l'augmentation de la viscosité au cours du cycle de mélange. La principale cause de la très forte hausse de la viscosité (de 10 Pa.s en début de malaxée à 500 Pa.s) pendant le malaxage est expliquée par l'amorce de réticulation du propergol. Dans certains cas, une modification de la rhéologie du composant est constatée.

Lorsque la viscosité du milieu est très élevée, le mélange est purement lié à l'action mécanique de l'agitateur utilisé, on parle alors de malaxage. En régime laminaire, la pâte est malaxée selon trois mécanismes de mélange décrits par Ottino (1989) et présentés à la Figure 1-2 :

- Étirement ;
- Repli ;
- Bris.

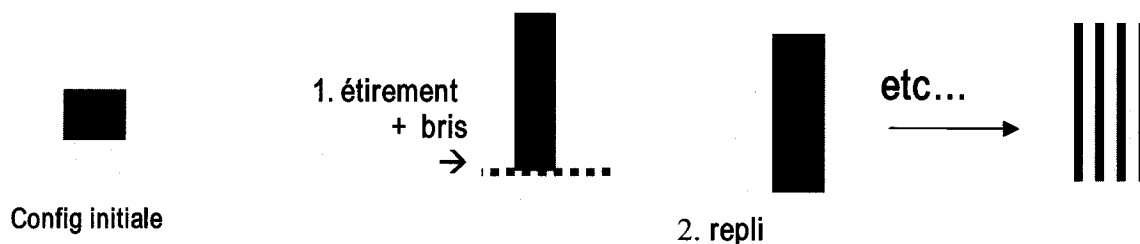


Figure 1-2 - Mécanisme de malaxage en régime laminaire

Le cycle de fabrication du propergol est complexe, coûteux et long ; jusqu'à plusieurs jours selon Chaminade (2006). Comme exposé dans Tanguy et coll. (1999), la ligne de production est soumise à deux contraintes principales :

- (a) Le fluide a un comportement pâteux et une viscosité très élevée. Sa limite d'écoulement est donc très vite atteinte et le mélange est réalisé en régime laminaire.
- (b) Les particules énergétiques doivent être distribuées et dispersées de la façon la plus homogène possible pour garantir les bonnes propriétés mécaniques et énergétiques du matériau.

L'efficacité du procédé d'homogénéisation d'un fluide dépend beaucoup du système de mélange utilisé. Lorsque la viscosité est très élevée, l'opération de malaxage est principalement réalisée par deux classes d'agitateurs. La première regroupe les agitateurs raclants de grand diamètre. On y retrouve les ancrs, les rubans hélicoïdaux, simples ou doubles (DHR), avec ou sans vis. Plus récemment, de nouveaux mélangeurs raclants ont été conçus. Le Maxblend, (Sumitomo Heavy Industries), ainsi que le Paravisc, (Ekato Industries), ont fait leur apparition. Le mode d'exploitation de ces systèmes d'agitation est en général à bas régime (< 100 tours/minute). La Figure 1-3 présente les agitateurs raclants les plus fréquemment utilisés.

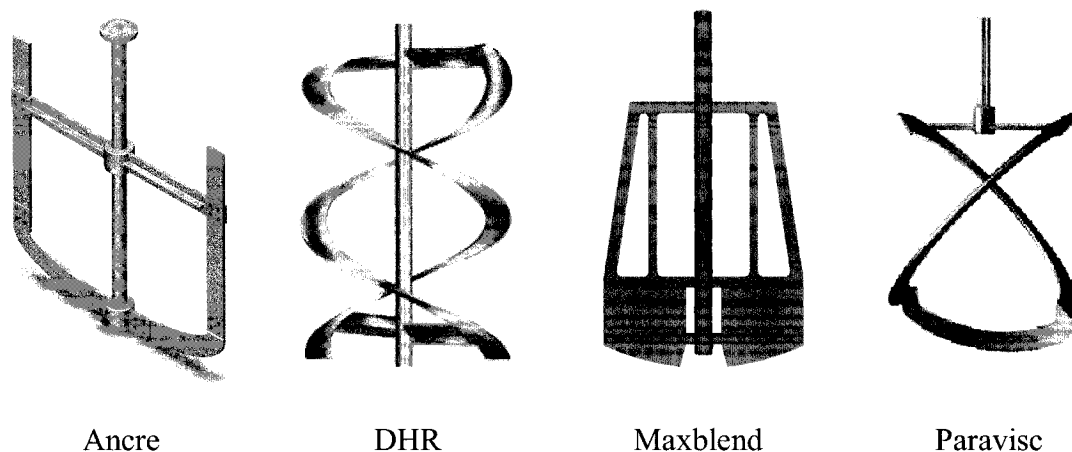
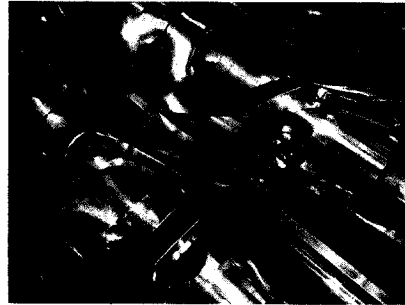
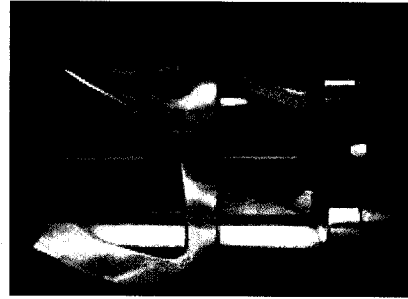


Figure 1-3 - Agitateurs raclants

La deuxième catégorie de systèmes d'agitation représente l'ensemble des malaxeurs à pales engrenées. Les malaxeurs peuvent être montés sur un ou plusieurs arbres horizontaux ou verticaux. Les malaxeurs horizontaux, aussi appelés à bras sigma ou en z s'avèrent être très efficaces pour les fluides de très grande viscosité (Hall et Godfrey, 1968). Ils ne garantissent toutefois pas l'étanchéité du milieu lors de leur fonctionnement. Pour contourner cette difficulté, les installations ont été montées sur un arbre vertical. Les malaxeurs verticaux les plus réputés sont ceux à mouvement planétaire. Ils sont constitués d'un ensemble d'agitateurs, jusqu'à quatre, engrenés et montés sur un carrousel en rotation. Ces montages permettent de balayer la totalité du volume de la cuve et assurent ainsi une bonne homogénéité du mélange. Les Figure 1-4 et Figure 1-5 présentent plusieurs types de malaxeurs.

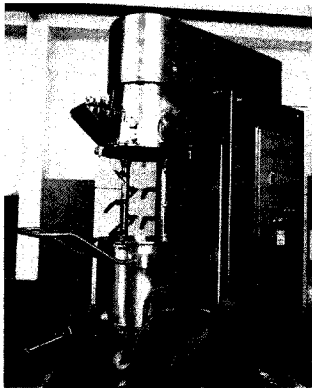


(© 2006 Jaygo Incorporated)

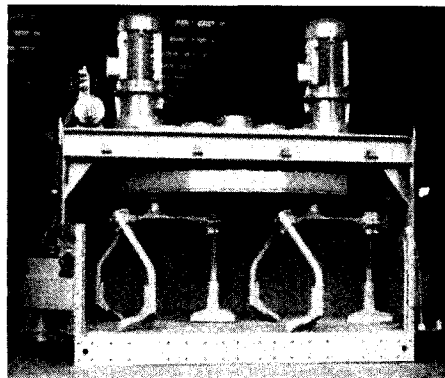


(© 2006 Charles Ross & Son Company)

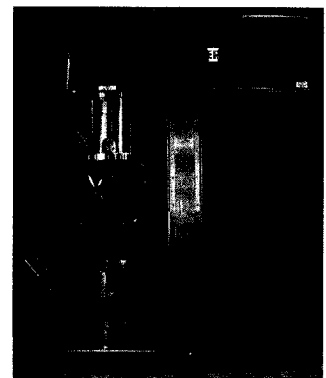
Figure 1-4 - Exemples de malaxeurs horizontaux



(B & P Process Equipment)



(SIPE S.r.l.)



(© 2005 Hockmeyer
Equipment Corporation)

Figure 1-5 - Exemples de malaxeurs planétaires

Enfin, l'homogénéisation des pâtes peut aussi être réalisée grâce à des systèmes de double-vis d'extrusion tel que présenté Figure 1-6. On notera dans ce cas l'analogie avec des agitateurs à pales engrenées.

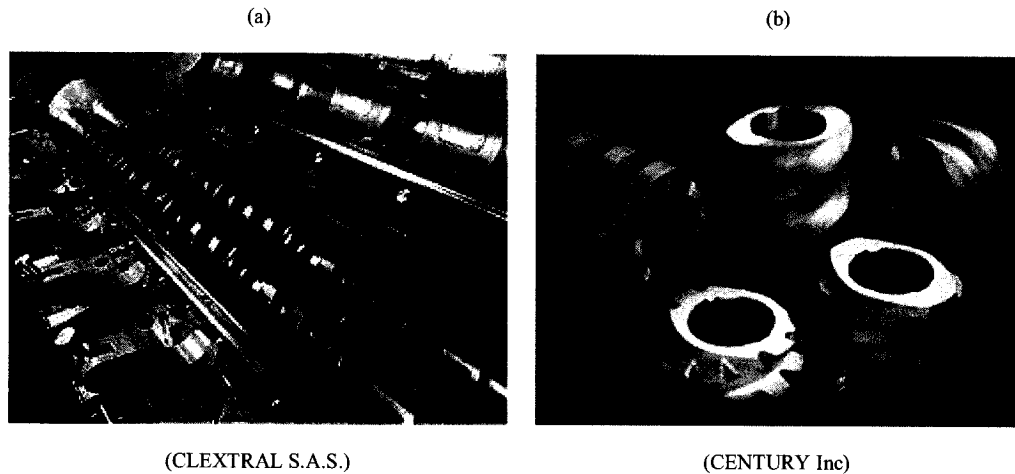


Figure 1-6 - (a) Bivis d'extrusion, (b) éléments de vis

D'une manière plus générale, le choix d'un système de mélange est essentiellement basé sur des considérations économiques (rentabilité, dimension de l'exploitation).

Depuis les années 60, la plupart des procédés de fabrication du propergol ont recours aux malaxeurs verticaux à mouvement planétaire. Dans cette étude, le mélangeur étudié comporte trois pales à mouvement planétaire dont la surface est hélicoïdale de façon à ce que les pales se nettoient entre elles (Figure 1-7). Les performances de cette installation sont étudiées grâce à l'évaluation de quantités macroscopiques comme le temps de mélange caractéristique ou la consommation de puissance qui seront présentées plus loin.

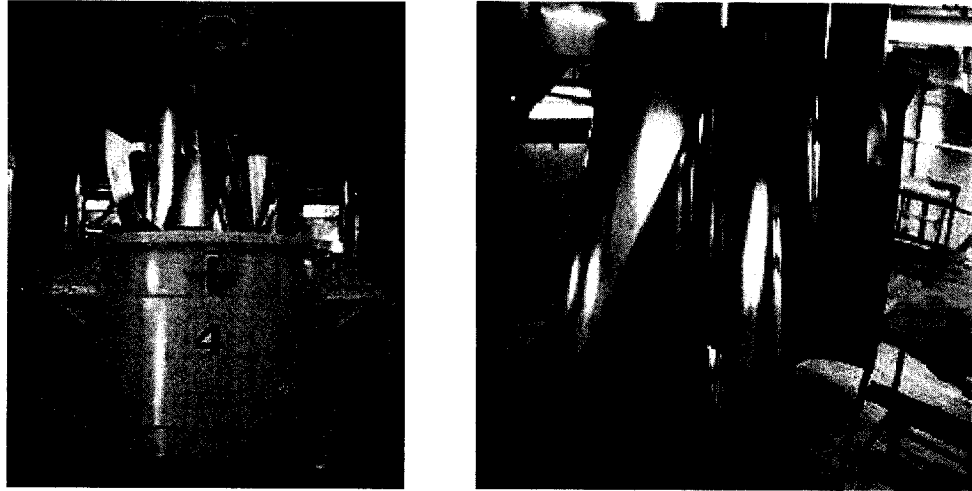


Figure 1-7 - Malaxeur tripale à mouvement planétaire (*SNPE, CNES*)

1.3 Problématique

Le potentiel des malaxeurs verticaux à mouvement planétaire a suscité de nombreuses investigations (Kol'man-Ivanov et coll. 1966, Bertrand 1995, Tanguy et coll. 1996, 1999, Zhou et coll. 2000, Jongen 2000, Clifford et coll. 2004, Delaplace et coll. 2007). Les études expérimentales s'avèrent néanmoins très coûteuses, tant au niveau de leur mise en œuvre, de leur coût, que de l'entretien des machines. La simulation numérique permet de s'affranchir de ses contraintes. Elle permet en particulier de calculer des grandeurs macroscopiques propres à chaque mélangeur, comme la puissance d'agitation et le temps de mélange. La modélisation numérique peut aussi être utilisée pour calculer des grandeurs qu'il est difficile d'obtenir par l'expérience, comme l'efficacité de mélange, l'intensité de ségrégation (Godfrey, 1986; Ottino, 1989; Tanguy et coll., 1992, 1996) ou encore pour quantifier et qualifier l'action mécanique reçue par un fluide visqueux lors d'une phase de mélange (Jongen,

2000). Cette information peut par la suite permettre d'établir un lien entre l'action mécanique du mélangeur et les propriétés du matériau obtenu.

1.4 Objectif général

Dans un contexte d'exploitation industrielle, les modèles employés pour la simulation numérique doivent être compétitifs en terme de rapidité et de précision. À cet effet, de nouvelles approches plus rapides et plus précises sont développées. L'objectif général de cette étude est de mettre au point une nouvelle méthode permettant de simuler le plus précisément possible des procédés industriels de mélange de fluide visqueux, comme la phase de préparation du propergol, dans des délais raisonnables.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

2.1 Conception des systèmes de mélange

2.1.1 Introduction

La caractérisation hydrodynamique d'un système de mélange est principalement basée sur l'analyse de quantités macroscopiques telles que la consommation de puissance et le temps de mélange. L'évaluation de ces grandeurs est souvent difficile et coûteuse, en particulier pour un malaxeur à mouvement planétaire, en raison des trajectoires complexes des pales. Les mesures sont en général effectuées sur des modèles à l'échelle du laboratoire. Les systèmes de mélange sont ensuite mis à l'échelle industrielle grâce à des lois d'extrapolation.

2.1.2 Principe de similitude

Celles-ci font appel aux notions de similitude telles que discutées par exemple par Coulson et Richardson (1993). La similitude géométrique entre un système de laboratoire et un système industriel est basée sur un rapport des dimensions caractéristiques constant. On parle de similitude cinématique entre deux systèmes lorsque le rapport des vitesses est le même en tout point. Ces principes sont les plus utilisés en pratique. Il existe aussi la similitude dynamique pour laquelle le rapport de forces, exprimé à l'aide de nombres adimensionnels (Reynolds, Froude), doit être invariable. Des similitudes sur la conservation de quantités macroscopiques telles que

la puissance par unité de volume, le temps de mélange peuvent aussi être envisagées. Concrètement, les conditions d'extrapolation sont assez mal connues, d'autant plus pour les mélangeurs à mouvement planétaire. C'est la raison pour laquelle la conception des malaxeurs à l'échelle industrielle est souvent empirique et approximative.

2.1.3 Caractérisation de l'écoulement d'un fluide

Les grandeurs macroscopiques caractéristiques du système de mélange dépendent très fortement de la nature de l'écoulement généré. Celui-ci est régi par le nombre de Reynolds :

$$Re = \frac{\rho ND^2}{\mu} = \frac{\text{force d'inertie}}{\text{force visqueuse}}. \quad [2-1]$$

Dans le domaine du mélange, l'écoulement est divisé en plusieurs régimes :

- Dans le cas des milieux pâteux à forte viscosité ou pour des vitesses d'agitation faibles, le régime d'écoulement est laminaire, c'est-à-dire que le fluide se déplace par couches qui glissent les unes sur les autres dans la direction de l'écoulement. Le nombre de Reynolds associé est petit ($Re < 10-50$).
- Pour des fluides très peu visqueux (par exemple de l'eau) ou pour des vitesses d'agitation grandes, les molécules du fluide ont un mouvement aléatoire et chaotique. L'écoulement est dit turbulent et le nombre de Reynolds est grand ($Re > 10^3 - 10^4$).

- Il existe un régime intermédiaire entre les deux précédents stades. Dans ce domaine, les vitesses sont légèrement perturbées et les trajectoires des molécules commencent à être irrégulières. On parle alors de régime de transition.

Dans le cas du malaxage en milieux pâteux, pour un écoulement laminaire, il est nécessaire de donner au fluide un mouvement d'ensemble de façon à limiter la formation de zones mortes. En général, le diamètre de l'agitateur est proche de celui de la cuve de mélange (Gogate et coll., 2000).

Les systèmes de mélange se caractérisent hydrodynamiquement en fonction de grandeurs macroscopiques telles que la consommation de puissance ou le temps de mélange. Ces quantités proviennent de corrélations faisant intervenir des nombres adimensionnels qui eux-mêmes mettent en jeu la géométrie du système d'agitation, la rhéologie du milieu et le régime de l'écoulement, (Holland et Chapman, 1966).

2.1.4 Consommation de puissance

La puissance consommée correspond à l'énergie transmise par unité de temps par l'agitateur au fluide. Cette grandeur est très fréquemment utilisée pour décrire l'efficacité d'un mélangeur. Dans le cas d'un fluide newtonien, elle est caractérisée par la corrélation suivante :

$$K_p = N_p \text{Re} = \frac{P}{\mu N^2 D^3} . \quad [2-2]$$

P est la puissance consommée, N_p est le nombre de puissance et est constant en régime turbulent. K_p correspond à une constante qui ne dépend que de la géométrie de l'agitateur et qui est constante en régime laminaire. Pour les fluides newtoniens la valeur K_p est relativement facile à trouver. La viscosité est en effet constante et permet de calculer directement le nombre de Reynolds de l'écoulement. Il suffit ensuite de tracer la courbe N_p par rapport à Re avec [2-1] et [2-2] pour obtenir K_p .

Dans le cas des fluides non newtoniens la viscosité évolue avec le cisaillement engendré par l'agitateur au cours de la phase de mélange. La détermination du nombre de Reynolds n'est alors plus évidente. Metzner et Otto (1957) ont introduit une technique dans laquelle une viscosité apparente ou de procédé est considérée. Celle-ci s'applique à toute la cuve agitée. L'hypothèse est ensuite faite que la vitesse de cisaillement s'exprime en fonction de la viscosité apparente par une constante de proportionnalité (analogie de Couette).

$$\gamma_a = Ks.N, \quad [2-3]$$

où Ks est une constante qui est propre à la géométrie du système. La valeur de cette grandeur peut être calculée par l'approche graphique de Metzner et Otto.

Pour un fluide de type loi de puissance, la viscosité apparente devient :

$$\eta_a = k(Ks.N)^{n-1}. \quad [2-4]$$

Une fois la viscosité de procédé connue pour différentes vitesses de rotation, il est aisé de déterminer un nombre de Reynolds généralisé.

$$\text{Re}_{gen} = \frac{\rho N^{2-n} D^2}{k \cdot K_s^{n-1}}, \quad [2-5]$$

et d'obtenir une courbe maîtresse de la consommation de puissance pour les fluides non newtoniens de type loi de puissance

La valeur de K_s peut aussi être calculée par l'approche conceptuelle de Rieger et Novak (1973). Pour les fluides de type lois de puissance, le nombre de Reynolds peut être défini par

$$\text{Re}_{pl} = \frac{\rho N^{2-n} D^2}{k}. \quad [2-6]$$

Le nombre de puissance N_p peut ensuite être calculé :

$$N_p = \frac{K_p}{\text{Re}} = \frac{K_p k (K_s N)^{n-1}}{\rho N D^2} = \frac{K_p K_s^{n-1}}{\text{Re}_{pl}}. \quad [2-7]$$

Ici, la grandeur $K_p(n)$ dépend de la géométrie mais aussi de l'indice de structure du fluide. Grâce à la définition de Re_{pl} , la constante K_s , propre à chaque agitateur peut être obtenue :

$$K_p(n) = K_p K_s^{n-1} \text{ d'où } K_s = \left(\frac{K_p(n)}{K_p} \right)^{\frac{1}{n-1}} \quad [2-8]$$

La consommation de puissance est par ailleurs affectée par la présence de chicanes. En effet, lorsque l'installation le permet, des chicanes sont fixées à la cuve. Elles constituent un ensemble de quatre lames de métal, plates, longeant verticalement la cuve et espacées de 90 degrés à la périphérie du réacteur, voir Figure 2-1.

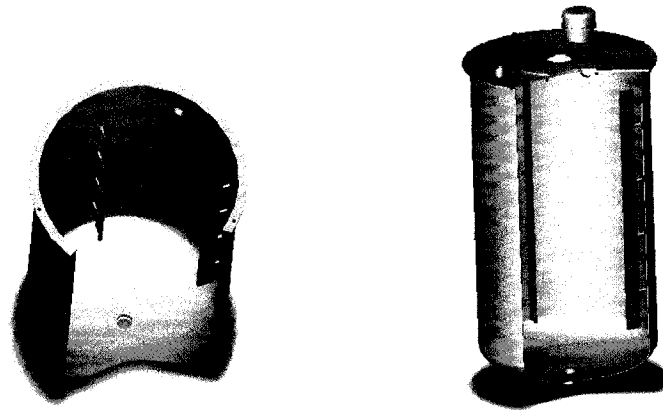


Figure 2-1- Chicanes montées sur une cuve

Ces lamelles sont utilisées pour empêcher le fluide d'adopter un mouvement solide dans la cuve. Elles préviennent aussi la formation de vortex, réduisent le temps de mélange et augmentent la puissance consommée. Les chicanes permettent d'augmenter la composante verticale de l'écoulement dans une cuve agitée. Cet avantage améliore en particulier la circulation du fluide dans la cuve et donc la qualité du mélange obtenu ; (Zlokarnik, 2000).

2.1.5 Temps de mélange

Cette grandeur caractéristique est aussi employée pour définir les performances d'un mélangeur dans des cuves agitées. Il se définit comme le temps nécessaire pour atteindre une homogénéité donnée après perturbation pour un système miscible. Le temps de mélange est relié au temps de circulation. Celui-ci correspond au temps nécessaire à une particule de fluide pour effectuer une boucle de la circulation créée par l'agitateur. Il s'exprime selon la formule :

$$t_c = \frac{V}{Q}, \quad [2-9]$$

V est le volume total du fluide agité et Q le débit de circulation. Cette dernière grandeur correspond au débit de fluide mis en mouvement par l'agitateur. Le temps de mélange se définit en fonction du temps de circulation selon :

$$t_m = \alpha t_c, \quad [2-10]$$

avec $\alpha > 1$.

L'homogénéité peut être définie par un indice de mélange M et la variance d'une concentration dans l'état initial non mélangé, notée σ_0^2 et dans un état de mélange, notée σ^2 (Desplanches et coll., 1999).

$$M = 1 - \frac{\sigma^2}{\sigma_0^2}. \quad [2-11]$$

L'indice varie entre 0 et 1. Un temps de mélange caractéristique correspond par exemple au temps nécessaire pour atteindre $M = 0,99$.

Le temps de mélange peut être représenté par la quantité adimensionnelle Nt_m . Une valeur constante de Nt_m signifie que le nombre de tours de l'agitateur nécessaires pour atteindre une homogénéité fixée est constant quelle que soit la vitesse d'agitation.

Le temps de mélange peut être déterminé par de nombreuses méthodes physiques et chimiques. Selon le volume de fluide étudié, la méthode peut être locale ou globale (Delaplace et coll., 2000).

2.1.6 Choix des grandeurs caractéristiques

Toutes les grandeurs caractéristiques dépendent du paramètre N qui correspond à la vitesse de rotation caractéristique du système d'agitation. Dans le cas de systèmes de mélange comme le malaxeur tripale à mouvement planétaire, il existe plusieurs vitesses de rotation. Le choix de la vitesse de rotation caractéristique du système est arbitraire. Dans cette étude, la vitesse choisie correspond à celle de la pale externe. C'est en effet celle qui génère les forces d'inertie les plus importantes.

Les performances du mélangeur peuvent être étudiées grâce à l'évaluation des quantités macroscopiques qui ont été présentées. Expérimentalement, cette tâche est complexe et coûteuse. La modélisation numérique apparaît alors comme une solution qui permet de s'affranchir de ces contraintes. La difficulté majeure qui apparaît dans la modélisation du procédé de malaxage réside dans le fait que la géométrie est constamment en mouvement. Ce dernier point exige la création d'un maillage des objets internes à chaque pas de temps, une tâche fastidieuse.

La partie suivante propose une revue de littérature sur les différentes méthodes numériques permettant d'éviter cette difficulté.

2.2 Modélisation numérique pour l'écoulement de fluides visqueux dans des domaines contenant des objets internes mobiles

Le problème de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire appartient à la catégorie des problèmes d'écoulement dans des domaines contenant des parties mobiles ou déformables. La modélisation de ces phénomènes a fait l'objet de recherches pendant plusieurs années. Cette partie reprend les principales méthodes depuis le commencement.

La première technique remonte aux années 70 avec Thompson et coll. (1974, 1985). Elle se base sur les coordonnées généralisées et permet de générer des maillages pour des domaines de formes diverses contenant un nombre quelconque de parties fixes. Pour une simulation transitoire d'écoulement dans un domaine à parties mobiles ou déformables, une telle méthode exigerait un nouveau maillage à chaque pas de temps, stratégie très coûteuse à l'époque.

Pour remédier à ce problème de remaillage répétitif, Perng et Murthy (1993) ont développé une technique évoquée par Rai (1985), encore utilisée à ce jour dans des codes de calculs industriels, pour la simulation de l'écoulement d'un fluide dans un réservoir agité. Cette méthode, dite du maillage glissant, consiste à utiliser deux maillages, l'un fixe (celui du réservoir) et l'autre mobile dans le temps (celui de

l'agitateur). Une interpolation conservative à l'interface entre les deux maillages à chaque pas de temps est cependant nécessaire. D'un point de vue pratique, cette contrainte n'est pas évidente à gérer. De plus, la méthode se prête mal à la simulation de procédés de mélange employant des agitateurs à parties mobiles, comme les agitateurs à pales engrenées.

Le début des années 90 et les progrès réalisés dans le domaine de l'informatique voient l'émergence de deux grandes méthodes qui sont, encore aujourd'hui, utilisées et améliorées.

2.2.1 Méthodes des frontières immergées (immersed boundary methods)

La première approche naît fin 80 avec Peskin et McQueen (1989) qui mettent au point la « méthode de la frontière immergée ». Cette stratégie a été développée initialement pour modéliser l'écoulement du sang dans les ventricules du cœur (domaine mobile et déformable). Un maillage fixe est utilisé et le mouvement des parois musculaires du cœur, les parties déformables, est modélisé par une série de points de contrôle sur lesquels des forces de tension sont imposées. Ces forces ne sont cependant pas connues a priori et reposent sur des modèles théoriques approximatifs. Sheth (1995) a utilisé cette méthode pour caractériser l'effet de l'inertie sur la déformation de gouttelettes en cisaillement simple.

Leveque et Li (1994) ont introduit une variante plus précise de la technique, appelée la « méthode de l'interface immergée ». Cette méthode est basée sur l'utilisation des conditions de saut dérivées près de la frontière. Li et Lai (2001) ont repris l'approche pour la résolution des équations de Navier-Stokes avec des forces singulières.

Goldstein et coll. (1993) ont présenté une autre forme de la méthode de la frontière immergée. Il s'agit de la « méthode de la frontière virtuelle ». Ici, la frontière de l'objet solide crée un champ de force qui est calculé a posteriori à partir de la différence entre la vitesse prédite et la vitesse réelle à la frontière. La technique a été utilisée pour simuler l'écoulement d'un fluide autour d'un cylindre. Cependant, la méthode a tendance à générer des oscillations autour de la solution. Pour atténuer ce phénomène, l'auteur propose de maintenir la valeur du nombre de CFL en dessous de 10^{-2} . Cette contrainte limite toutefois beaucoup le potentiel d'utilisation de la méthode.

Bien que le modèle de la frontière immergée de Peskin et McQueen (1989) ait initialement été développé pour des problèmes d'interactions fluides structures élastiques, elle a aussi été employée pour simuler des écoulements avec des frontières rigides. Lai et Peskin (2000) ont par exemple proposé une nouvelle méthode de la frontière immergée permettant de simuler des écoulements dans un cylindre rigide. La frontière rigide est modélisée par un ressort et la force associée est générée en réaction au déplacement des points de la frontière. Comme cette force est calculée dans tout le volume au début de chaque pas de temps, le problème devient très raide et peut générer des oscillations à la frontière si le pas de temps n'est pas assez petit.

Tseng et Ferziger (2003) ont développé une nouvelle approche, inspirée par Fadlun et coll. (2000), faisant appel à des cellules fantômes. La frontière immergée est représentée par des fonctions linéaires continues par morceaux. Les cellules fantômes se trouvent à l'intérieur de l'objet et sont superposées sur le maillage du volume fluide. Les valeurs des variables fluides dans ces cellules sont obtenues par extrapolation avec un schéma local d'ordre quadratique faisant appel aux variables fluides des nœuds voisins. Cette procédure, bien qu'elle soit très précise, reste très coûteuse, surtout pour des simulations transitoires. Su et coll. (2007) ont très récemment travaillé sur une nouvelle technique d'imposition qui permet à la fois de contourner la contrainte du nombre de CFL très petit et de faciliter la détermination des forces associées à la frontière. Cette méthode reste pour le moment limitée à des cas en deux dimensions. Mentionnons également Ramière et coll. (2007) qui ont dernièrement proposé une nouvelle approche de la frontière immergée de Peskin et McQueen (1989).

Le principal inconvénient de cette classe de méthodes réside dans l'hypothèse faite que la structure immergée se comporte comme un réseau de fibres avec masse, mais qu'elle n'occupe aucun volume dans le domaine fluide. Dans les cas des problèmes d'écoulement de fluide dans des domaines comprenant des objets internes occupant un espace important, la solution obtenue avec ce type de méthode peut être inexacte. De plus, les différentes formes de la méthode des frontières immergées semblent souffrir de plusieurs limitations. Soit elles exigent des pas de temps très

petits, soit leurs schémas sont difficiles à implanter. Ces raisons nous ont donc poussés à nous orienter vers une autre approche.

2.2.2 Méthodes des domaines fictifs (fictitious domain methods)

La deuxième grande méthode qui permet de solutionner des problèmes d'écoulements de fluide dans des géométries contenant des objets mobiles ou déformables a été proposée par Glowinski et coll. (1994) puis par Bertrand et coll. (1997). Elle s'intitule « la méthode des domaines fictifs » aussi connue sous le nom de « la méthode des domaines enfoncées ». Celle-ci est basée sur l'utilisation explicite de multiplicateurs de Lagrange pour le traitement des conditions aux limites devant être imposées sur la frontière des parties internes du domaine d'étude. Ces dernières sont traitées comme des contraintes cinématiques imposées sur des points de contrôle puis intégrées dans la formulation variationnelle des équations d'échange au moyen d'une méthode de lagrangien augmenté. Sheehy (1994) a utilisé cette technique pour le refroidissement de profilés d'extrusion. Par ailleurs, Glowinski et coll. (1994) a simulé l'écoulement tridimensionnel d'un fluide newtonien visqueux autour d'une sphère discrétisée de façon fictive. Cette méthode a par ailleurs été largement mise à contribution par Bertrand et coll. (1997), notamment dans le domaine du mélange. Ces travaux seront présentés par la suite.

En comparaison avec la méthode de la frontière immergée, la méthode des domaines fictifs ne requiert pas l'utilisation de forces empiriques. Elle paraît donc plus flexible sur le plan pratique.

Avalosse et Crochet (1997) ont développé une méthode inspirée des domaines fictifs, intitulée « technique de la superposition de maillages ». Cette technique consiste à superposer un maillage dynamique, représentant les objets internes en mouvement, sur un maillage statique du domaine fluide. À chaque pas de temps, la position du maillage dynamique des objets est mise à jour et une procédure identifie si les éléments du maillage fluide sont situés à l'intérieur ou à l'extérieur des objets internes. Lorsqu'un élément fini du maillage statique est sur la frontière de l'objet, le vecteur vitesse associé à la rotation du mobile est alors imposé sur chacun des noeuds de cet élément. Les vecteurs vitesse sont ensuite pris en compte dans les équations d'échanges. Cette méthode, simple à mettre en oeuvre, a été employée pour modéliser un écoulement dans le fourreau d'une extrudeuse baxis en deux dimensions (Avalosse et Crochet, 1997) puis en trois dimensions (Avalosse et coll., 2002). Connelly et coll. (2006) ont mis à profit cette technique pour simuler l'opération de mélange d'un fluide visqueux dans un mélangeur à pales sigma. La qualité de cette méthode reste toutefois limitée en particulier au niveau de la description de la géométrie des mobiles. En effet, les noeuds sur lesquels les vecteurs vitesses sont imposés sont situés sur le maillage fluide. Comme la description de la cinématique des objets internes dépend de la position des noeuds sur le maillage statique, un maillage suffisamment fin est nécessaire pour traiter adéquatement les géométries. D'un point de vue industriel, les délais associés au temps de calcul sont souvent inadéquats.

Bertrand et coll. (1997) ont proposé une variante de la méthode des domaines fictifs. Il s'agit de « la méthode des éléments finis virtuels ». Elle se distingue de la

méthode de Glowinski et coll. (1994) par sa manière d'intégrer les contraintes cinématiques dans les équations d'échange. Dans cette dernière, l'évaluation d'une intégrale de bord sur la frontière est nécessaire pour intégrer les contraintes cinématiques associées aux points de contrôle. Cette procédure est coûteuse et difficile à mettre en œuvre. Pour éviter cette difficulté, un principe de collocation est utilisé : chaque composante du multiplicateur de Lagrange est approchée à l'aide d'une constante par point de contrôle. Cette approche est moins précise que la précédente. Elle permet toutefois de s'affranchir de l'évaluation d'intégrales de bord et facilite l'implantation de la méthode.

Le système d'équations de conservation de la quantité de mouvement, de la matière et des contraintes cinématiques est ensuite résolu à l'aide de la méthode des éléments finis.

Dans leur méthode, Bertrand et coll. (1997) discrétisent le système d'équations avec un élément fini en trois dimensions appartenant à la classe des éléments à pression discontinue. Ces derniers présentent l'avantage de conserver la masse localement et donc d'être plus précis. L'élément utilisé, dénoté $P_1^+ - P_0$ et présenté à la Figure 2-2, est tétraédrique. Il comporte vingt-quatre degrés de liberté en vitesse répartis sur huit nœuds (les quatre sommets du tétraèdre et les milieux de chaque face). La pression est approchée par une constante au barycentre de l'élément. Chaque composante du multiplicateur de Lagrange est approchée à l'aide d'une constante par point de contrôle.

Vitesse

Pression

Figure 2-2 - Élément fini $P_1^+-P_0$

Les équations aux dérivées partielles sont ainsi réduites à un système d'équations algébriques. L'algorithme d'Uzawa est utilisé afin de permettre une résolution découplée de ces équations. Celui-ci se divise en trois parties. La première correspond à la résolution du système linéaire en vitesse, dénommé problème primal. La deuxième étape, qu'on appelle problème dual, permet de résoudre le système en pression. La dernière s'apparente aussi à un problème dual et consiste à mettre à jour les multiplicateurs de Lagrange associés aux contraintes cinématiques.

Cette méthode a permis à Bertrand et coll. (1997) et Tanguy et coll. (1999) de simuler un écoulement en trois dimensions dans un malaxeur bipale à mouvement planétaire. De la Villéon et coll. (1998) ont simulé un écoulement tridimensionnel dans un mélangeur à ruban hélicoïdal. Plus récemment, Rivera et coll. (2006) ont modélisé en trois dimensions un mélangeur co-axial, Iranshahi et coll. (2006) ont réalisé l'étude des performances de mélange du mélangeur Paravisc en trois dimensions. Barailler et coll. (2006) ont fait une étude tridimensionnelle sur un mélangeur de type rotor-stator. Enfin Coesnon et coll. (2005) ont réalisé des simulations en trois dimensions de

l'écoulement dans un malaxeur tripale à mouvement planétaire. Les temps de calcul ont cependant été de plusieurs jours.

Jongen (2000) a utilisé une variante de la méthode des éléments finis virtuels pour simuler des opérations de malaxage sur des pâtes. L'auteur a ainsi pu étudier l'influence des configurations de plusieurs mélangeurs sur les différentes déformations auxquelles étaient soumis les fluides. Cette étude n'a cependant été réalisée qu'en deux dimensions. D'autre part, l'auteur ne fait pas référence à ses temps de calcul.

Signalons finalement que Glowinski et coll. (2006) ont utilisé leur méthodologie numérique fondée sur la combinaison d'une approximation par éléments finis et d'une méthode des domaines fictifs pour simuler des phénomènes de séparation multi-échelle ayant lieu dans des fluides visqueux newtoniens incompressibles.

2.2.3 Autres méthodes

De nombreuses autres méthodes pour la simulation de fluides visqueux dans des domaines contenant des objets internes mobiles ou déformables ont vu le jour à partir de 1995 : Bernardi et coll. (1993), « la méthode de l'élément mortier »; Latché et coll. (1996), « la méthode de Galerkin adaptée »; Angot et coll. (1998), « la méthode de la pénalisation ». Johannssen et coll. (2001) a introduit « la méthode des domaines tronqués ». Thibault et coll. (2003) ont combiné la méthode des éléments finis virtuels à une stratégie de maillage adaptatif automatique pour les simulations d'écoulement de fluide incompressible visqueux dans des extrudeuses baxis, c'est-à-dire dans des

géométries contenant des objets mobiles avec des entrefers très petits. Toutes ces méthodes découlent des deux principales techniques citées plus haut.

Zhang et coll. (2004) ont en particulier introduit « la méthode des éléments finis immergés », basée sur les travaux de Wang et Liu (2004). Ici, le domaine fluide et l'objet interne sont discrétisés par éléments finis. Selon les auteurs, les contraintes calculées sont plus précises et les résultats obtenus plus réalistes que pour la méthode la frontière immergée de Leveque et Li (1994). Le modèle de Zhang permet de modéliser plusieurs lois de comportement pour le solide immergé. Cette méthode a permis de simuler plusieurs écoulements faisant intervenir un nombre important de particules mobiles et déformables soumises à d'importantes déformations.

Des techniques hybrides couplant plusieurs méthodes peuvent aussi être trouvées dans la littérature. Baaijens et coll. (2001) et Van Loon et coll. (2004) ont par exemple couplé la méthode des domaines fictifs de Bertrand et coll. (1994) à une procédure de maillage adaptatif autour de la frontière immergée pour modéliser l'écoulement du sang dans les ventricules du cœur (parois déformables). Cette application reste limitée à un cas bidimensionnel.

Fries et coll. (2006) a combiné la méthode des éléments finis à la méthode dite « sans maillage », proposée par Belytschko (1993). Initialement développée pour des problèmes de propagation de fissure où l'interface solide/fluide est constamment en mouvement, cette stratégie permet d'obtenir une solution sur un ensemble de nœuds sans remaillage au cours du temps. Elle est toutefois très coûteuse. C'est la raison pour

laquelle Fries n'utilise la méthode sans maillage que dans des zones avec de larges déformations ou au voisinage d'objets internes mobiles. Là où l'écoulement est moins « perturbé », il emploie les éléments finis standard. Cette méthode a été testée sur plusieurs cas académiques dont un écoulement autour d'un cylindre, fixe et en rotation sur lui-même, et a montré des résultats concordant avec l'expérience. Elle présente cependant certaines difficultés de stabilisation. D'autre part, à notre connaissance, aucune mention n'est faite par rapport aux temps de calcul permettant d'envisager une application, dans des délais raisonnables, à un cas industriel, comme l'écoulement d'une pâte dans un malaxeur tripale à mouvement planétaire.

Tout récemment, Mourad et coll. (2007) ont mis en avant une nouvelle stratégie pour l'imposition de contraintes de Dirichlet pour des problèmes d'écoulement dans des domaines contenant des objets internes mobiles ou déformables. Jusqu'à ce jour, la plupart des méthodes inventées pour ces problèmes utilisaient des multiplicateurs de Lagrange pour introduire ces contraintes dans les équations de mouvement. En procédant de la sorte, il arrive que la condition inf-sup (Babuska, 1973) associée à la méthode des éléments finis ne soit plus vérifiée. Pour répondre au problème, ces auteurs proposent une autre stratégie, facile à implanter, stable et robuste, basée sur les travaux de Hughes et coll. (1995, 1998) et de Brezzi et coll. (1992). Il s'agit de décomposer le volume fluide en deux échelles, une grossière et une fine. La méthode a été utilisée pour résoudre un problème simple de Laplace, représentatif de la plupart des modèles avec des interfaces immergées comme par exemple des problèmes transitoires d'évolution de fissure au cours du temps. Elle présente des résultats très

encourageants pour la suite. Les auteurs indiquent cependant que leur méthode est encore en cours de développement et ne mentionnent pas leur temps de calcul.

CHAPITRE 3 OBJECTIFS SPÉCIFIQUES

Toutes ces avancées ont été rendues possible par les nombreux progrès réalisés en capacités de calcul. À la vue de toutes ces méthodes, il semblerait néanmoins que peu soient vraiment adaptées à la simulation du cas industriel de l'écoulement instationnaire dans un malaxeur tripale à mouvement planétaire, compte tenu des impératifs de temps dans l'industrie. En particulier, la méthode des éléments finis virtuels de Bertrand et coll. (1997), qui est une méthode de domaine fictif à lagrangiens distribués, semble la mieux adaptée à la simulation de l'écoulement dans des mélangeurs à mouvement planétaire. Elle présente toutefois, dans sa forme actuelle, des temps de calcul trop importants. La limitation de la méthode des éléments finis virtuels de Bertrand et al. (1997) est principalement due à un nombre trop important d'itérations dans la méthode de résolution basée sur l'algorithme d'Uzawa et à l'utilisation d'un élément fini comprenant un nombre élevé de degrés de liberté et donc coûteux.

Les objectifs spécifiques de cette étude sont donc de revisiter la méthode des éléments finis virtuels de Bertrand et coll. (1997), au niveau :

- De son approche de résolution ;
- Des éléments finis mis à profit.

Le nouveau modèle devra respecter les contraintes industrielles d'aujourd'hui, à savoir :

- Rapidité : la durée d'un calcul doit répondre aux délais industriels actuels (typiquement, une heure) ;
- Précision : le gain en vitesse obtenu ne doit pas être fait au détriment de l'exactitude du calcul.

CHAPITRE 4 MÉTHODOLOGIE

4.1 Introduction

L'objet de cette partie est de présenter une méthode numérique pour modéliser l'écoulement incompressible d'un fluide pâteux dans un malaxeur tripale à mouvement planétaire. Dans cette optique, les équations régissant ce phénomène sont rappelées dans une première section. Puis celles-ci sont transformées en un problème d'optimisation avec contrainte qui est discrétisé par la méthode des éléments finis virtuels de Bertrand et coll. (1997). Finalement, différentes approches de résolution sont proposées.

4.2 Équations d'échange

L'écoulement d'un fluide visqueux incompressible dans un domaine Ω de frontière Γ est régi par les équations de Navier-Stokes qui caractérisent la conservation de la quantité de mouvement et de la matière :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{grad} \mathbf{v} \right) + \mathbf{div} \boldsymbol{\tau} + \mathbf{grad} p = \mathbf{f}, \quad \text{dans } \Omega, \quad [4-1]$$

$$\mathbf{div} \mathbf{v} = 0, \quad \text{dans } \Omega. \quad [4-2]$$

\vec{v} est le vecteur vitesse, p correspond à la pression et ρ représente la masse volumique du fluide. Dans ces équations, le tenseur des contraintes τ est relié au champ des vitesses par une équation d'état rhéologique de la forme

$$\tau = -2\eta(\dot{\gamma})\dot{\gamma}, \quad [4-3]$$

avec

$$\dot{\gamma} = \frac{1}{2} \left[\text{grad } \mathbf{v} + (\text{grad } \mathbf{v})^T \right]. \quad [4-4]$$

Dans ce travail, nous utiliserons le modèle newtonien pour lequel

$$\eta(\dot{\gamma}) = \mu. \quad [4-5]$$

Pour que le problème soit bien posé, les équations [4-1] et [4-2] doivent être complétées par des conditions aux limites. Celles-ci dépendent du référentiel de travail. Dans le cas d'un agitateur placé en rotation autour de l'axe central d'un réservoir cylindrique à la vitesse ω , il est utile de considérer le système de l'agitateur comme système de référence. Dans ce repère, dit lagrangien, le mobile est fixe et la paroi du réservoir tourne autour du même axe, mais à la vitesse $-\omega$. Ainsi, si l'écoulement est périodique dans le repère du laboratoire, on peut considérer que le problème est stationnaire dans le repère lagrangien. De ce fait, la modélisation par éléments finis de ce problème ne nécessite plus qu'un seul maillage et les conditions aux limites sont indépendantes du temps. Il faut cependant noter que le nouveau référentiel est soumis à une accélération constante et qu'il n'est donc plus galiléen. Des forces centrifuges et de Coriolis doivent donc être ajoutées dans les équations de la conservation de la quantité de mouvement

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{grad} \mathbf{v} + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) + 2\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} \right) + \mathbf{div} \boldsymbol{\tau} + \mathbf{grad} p = \mathbf{f}, \text{ dans } \Omega. \quad [4-6]$$

Cette approche a été privilégiée par Tanguy et coll. (1992) pour modéliser l'écoulement d'un fluide dans un réservoir muni d'un ruban hélicoïdal et par Iranshahi et coll. (2006) pour simuler l'écoulement d'un fluide dans un réservoir muni d'un mélangeur Paravisc.

Pour les malaxeurs tripales à mouvement planétaire, le mouvement des pales est beaucoup plus complexe et ne permet pas de travailler en repère lagrangien. Une simulation instationnaire est donc indispensable.

4.3 Méthode des domaines fictifs par lagrangien

4.3.1 Introduction

Cette section propose une méthode pour résoudre les équations présentées précédemment. Celles-ci sont transformées en un problème d'optimisation avec contraintes par la méthode des domaines fictifs, initialement proposée par Glowinski et coll. (1994), faisant intervenir des multiplicateurs de Lagrange distribués.

4.3.2 Traitement de la contrainte d'incompressibilité

Considérons un écoulement laminaire d'un fluide newtonien et incompressible dans une géométrie Ω , de frontière Γ . Ce problème est représentatif d'un cas de mélange de pâte avec un mélangeur planétaire. Les équations de la conservation de la quantité de mouvement et de la masse [4-1] et [4-2], simplifiées, donnent le problème de Stokes :

$$-\mu \Delta \mathbf{v} + \mathbf{grad} \, p = \mathbf{f}, \text{ in } \Omega, \quad [4-7]$$

$$\mathbf{div} \mathbf{v} = 0, \quad \text{in } \Omega. \quad [4-8]$$

Des conditions aux limites homogènes de Dirichlet sont imposées sur la frontière Γ . Il est facile de prouver que pour $\mathbf{v} \in [H_0^1(\Omega)]^3$, la résolution du problème [4-7]-[4-8] est équivalente à celle du problème d'optimisation avec contraintes suivant :

$$\inf_{\substack{\mathbf{u} \in [H_0^1(\Omega)]^3 \\ \mathbf{div} \mathbf{u} = 0}} \frac{\mu}{2} \int_{\Omega} |\mathbf{grad} \mathbf{u}|^2 d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} d\Omega, \quad [4-9]$$

Classiquement, un multiplicateur de Lagrange $p \in L^2(\Omega)$ est introduit pour transformer ce problème en un problème de point selle.

$$\inf_{\substack{\mathbf{v} \in [H_0^1(\Omega)]^3 \\ \mathbf{div} \mathbf{v} = 0}} \sup_{p \in L^2(\Omega)} L(\mathbf{v}, p), \quad [4-10]$$

où la quantité,

$$L(\mathbf{v}, p) = \frac{\mu}{2} \int_{\Omega} |\mathbf{grad} \mathbf{v}|^2 d\Omega - \int_{\Omega} p \mathbf{div} \mathbf{v} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega, \quad [4-11]$$

est appelé le lagrangien. Dans cette dernière expression, il apparaît que la pression p peut être considérée comme un multiplicateur de Lagrange servant à forcer la contrainte d'incompressibilité. Pour des questions de convergence, une variante de cette méthode est souvent utilisée. Elle consiste à utiliser un Lagrangien augmenté à la place du Lagrangien classique $L(\mathbf{v}, p)$. Dans le Lagrangien augmenté, un terme de

pénalisation r est ajouté au Lagrangien classique pour renforcer la contrainte d'incompressibilité :

$$L_r(v, p) = L(v, p) + \frac{r}{2} \int_{\Omega} |\operatorname{div} v|^2 d\Omega, \quad [4-12]$$

Le problème [4-10] peut être exprimé sous forme variationnelle au moyen des équations d'Euler:

$$a(u, \psi) - b(\psi, p) = (f, \psi), \quad \forall \psi \in [H_0^1(\Omega)]^3, \quad [4-13]$$

$$b(u, \phi) = 0, \quad \forall \phi \in L^2(\Omega), \quad [4-14]$$

avec

$$a(u, \psi) = \mu \int_{\Omega} \operatorname{grad} u \cdot \operatorname{grad} \psi d\Omega, \quad [4-15]$$

$$b(u, \phi) = \int_{\Omega} \phi \cdot \operatorname{div} u d\Omega. \quad [4-16]$$

$(.,.)_{\Omega}$ correspond au produit scalaire classique dans $L^2(\Omega)$:

$$(u, v)_{\Omega} = \int_{\Omega} u \cdot v d\Omega, \quad \forall u, v \in L^2(\Omega). \quad [4-17]$$

Ces équations s'obtiennent à partir de la dérivée Gâteaux du problème [4-10].

La partie suivante montre comment, de la même façon, les contraintes cinématiques peuvent être intégrées aux équations d'échange au moyen de multiplicateurs de Lagrange.

4.3.3 Traitement des contraintes cinématiques

Soit un domaine Ω de frontière Γ , à l'intérieur duquel se trouve un objet (éventuellement une partie mobile) Ω^* , de frontière Γ^* , présenté Figure 4-1.

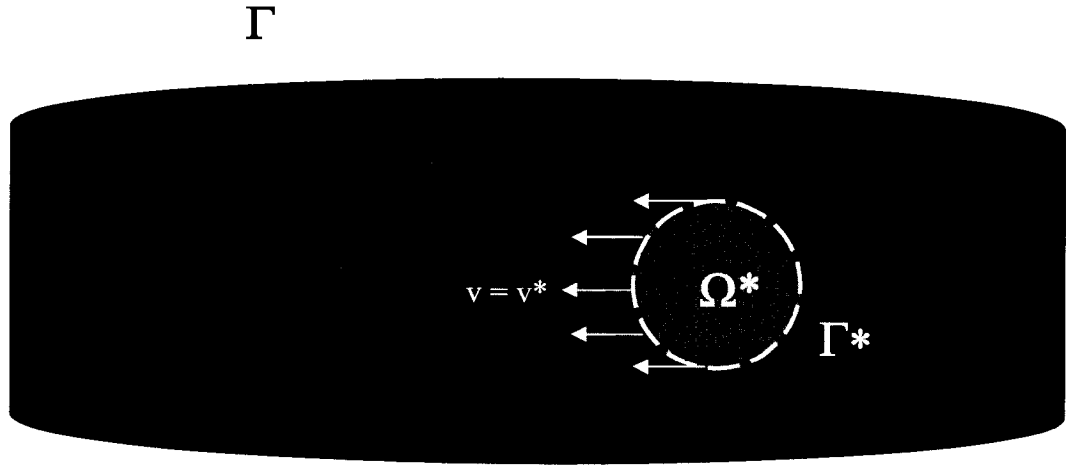


Figure 4-1 – Domaine fluide contenant un objet interne

Comme précédemment, on considère l'écoulement laminaire d'un fluide newtonien incompressible dans Ω . L'écoulement est régi par les équations de Stokes, complétées par des conditions aux limites de type Dirichlet sur la frontière $\Gamma \setminus \Gamma^*$:

$$-\mu \Delta \mathbf{v} + \text{grad } p = \mathbf{f}, \text{ in } \Omega \setminus \Omega^*, \quad [4-18]$$

$$\text{div } \mathbf{v} = 0, \quad \text{in } \Omega \setminus \Omega^*, \quad [4-19]$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad \text{on } \Gamma, \quad [4-20]$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^*, \quad \text{on } \Gamma^*, \quad [4-21]$$

où \mathbf{v}^* est le vecteur vitesse de l'objet virtuel Ω^* sur la frontière Γ^* .

La méthode des domaines fictifs par lagrangien de Bertrand et coll. (1997) consiste à traiter l'objet interne Ω^* comme un obstacle à l'écoulement dans Ω ,

modélisé par une série de contraintes cinématiques imposées sur la frontière Γ^* . De manière analogue au traitement de la condition d'incompressibilité tel que discuté précédemment, cette méthode consiste à résoudre le problème [4-18] - [4-21] sous la forme d'un problème d'optimisation avec contraintes :

$$\inf_{\substack{\mathbf{v} \in [H_0^1(\Omega)]^3 \\ \mathbf{v}|_{\Gamma^*} = \mathbf{v}^*}} \sup_{\mathbf{p} \in L^2(\Omega)} L_r(\mathbf{v}, \mathbf{p}), \quad [4-22]$$

où $L_r(\mathbf{v}, \mathbf{p})$ est le lagrangien [4-12]. Cette opération de transformation constitue le principe de la méthode des domaines fictifs par lagrangien. Comme précédemment, les contraintes cinématiques sont introduites sous la forme de multiplicateurs de Lagrange. Le problème [4-22] est exprimé sous la forme du problème de point-selle

$$\inf_{\mathbf{v} \in [H_0^1(\Omega)]^3} \sup_{\mathbf{p} \in L^2(\Omega)} \sup_{\boldsymbol{\lambda} \in [L^2(\Gamma^*)]^3} L_{rs}^*(\mathbf{v}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}), \quad [4-23]$$

où $\boldsymbol{\lambda} \in [L^2(\Gamma^*)]^3$ correspond au multiplicateur de Lagrange représentant les contraintes cinématiques prescrites sur la frontière Γ^* de l'objet mobile et

$$L_{rs}^*(\mathbf{v}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}) = L_r(\mathbf{v}, \mathbf{p}) - \int_{\Gamma^*} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}^*) d\Gamma + \frac{s}{2} \int_{\Gamma^*} |\mathbf{v} - \mathbf{v}^*|^2 d\Gamma, \quad [4-24]$$

est le lagrangien augmenté. Dans [4-24], s est un paramètre de pénalisation, introduit pour les mêmes raisons que dans [4-12]. Les équations d'Euler caractérisant la solution du problème de point selle [4-23] sont données par :

$$\mathbf{a}(\mathbf{v}, \boldsymbol{\psi}) = (\mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}) + \mathbf{b}(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{p}) + (\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\psi})_{\Gamma^*}, \quad \forall \boldsymbol{\psi} \in [H_0^1(\Omega)]^3, \quad [4-25]$$

$$\mathbf{b}(\mathbf{v}, \boldsymbol{\phi}) = 0, \quad \forall \boldsymbol{\phi} \in L^2(\Omega), \quad [4-26]$$

$$((\mathbf{v} - \mathbf{v}^*), \boldsymbol{\xi})_{\Gamma^*} = 0, \quad \forall \boldsymbol{\xi} \in [L^2(\Gamma^*)]^3. \quad [4-27]$$

Elles peuvent être retrouvées en appliquant la dérivée de Gâteaux au problème [4-23], en réglant les quantités r et s à 0. Ces équations constituent un problème mixte en vitesse \mathbf{v} , en pression p et en multiplicateur de Lagrange λ . Ces équations sont à la base du développement de la nouvelle méthode.

4.4 Discrétisation : la méthode des éléments finis virtuels

4.4.1 Introduction

Dans cette section, le problème d'optimisation avec multiplicateur de Lagrange obtenu à l'aide de la méthode des domaines fictifs par lagrangien est discrétisé par la méthode des éléments finis virtuels de Bertrand et coll. (1997). Les espaces de discrétisation correspondant au champ des vitesses, à la pression et au multiplicateur de Lagrange sont détaillés dans cette partie.

4.4.2 Approximation du champ des vitesses et de la pression

La discrétisation des équations [4-25], [4-26] et [4-27] est effectuée par la méthode des éléments finis. La vitesse \mathbf{v} , la pression p et le multiplicateur de Lagrange λ sont approchés dans des espaces vectoriels qui vont être détaillés ici. Les inconnues $\mathbf{v}_h, p_h, \lambda_h$ représentent les variables discrètes. Les équations d'Euler discrétisées sont

$$a(\mathbf{v}_h, \psi_h) = (\mathbf{f}_h, \psi_h) + b(\psi_h, p_h) + (\lambda_h, \psi_h)_{\Gamma^*}, \quad \forall \psi_h \in [H_0^1(\Omega)]^3, \quad [4-28]$$

$$b(\mathbf{v}_h, \phi_h) = 0, \quad \forall \phi_h \in L^2(\Omega), \quad [4-29]$$

$$((\mathbf{v}_h - \mathbf{v}^*), \xi_h)_{\Gamma^*} = 0, \quad \forall \xi_h \in [L^2(\Gamma^*)]^3. \quad [4-30]$$

Le choix des espaces d'approximation pour la simulation d'un écoulement tridimensionnel d'un fluide visqueux, incompressible est de la plus haute importance. Il a en effet un impact très important sur la précision et le temps des calculs. Par ailleurs, il est bien connu que pour garantir la stabilité de la méthode des éléments finis, les éléments de l'espace de discrétisation doivent satisfaire la condition de stabilité de Brezzi-Babuska. Les formulations qui ne la vérifient pas présentent souvent des instabilités, en particulier au niveau de la pression.

L'élément fini doit aussi être choisi en fonction du type de maillage utilisé. Si la structure de Ω est triviale, les simulations peuvent être effectuées sur des maillages structurés simple. Dans de telles situations, les éléments finis de type hexaédriques sont souvent mis à profit. Toutefois, dans la plupart des cas, les géométries étudiées sont complexes, surtout pour les cas industriels. Les éléments finis tétraédriques sont alors préférés.

En règle générale, les éléments finis utilisés pour modéliser l'écoulement d'un fluide sont classés selon leur approximation en pression qui est soit continue, soit discontinue.

Dans les éléments finis à pression discontinue, les degrés de liberté en pression sont à l'intérieur de l'élément. Ce dernier point implique que la loi de conservation de

la masse est assurée localement, c'est-à-dire dans l'élément. Parmi les éléments à pression discontinue figurent l'élément quadratique de Crouzeix-Raviart ($P_2^+-P_1$) et l'élément linéaire $P_1^+-P_0$ (présenté à la Figure 4-2). Celui-ci a déjà été mis à contribution, par Bertrand et coll. (1997, 2003) et Tanguy et coll. (1999), dans un contexte de mélange.

Vitesse

Pression

Figure 4-2 - Élément fini $P_1^+-P_0$

La seconde classe d'éléments approche la pression de façon continue. Avec cette approche dans laquelle la masse n'est conservée que globalement, la solution est souvent moins précise. Dans certains cas, des oscillations sur le champ des vitesses ou de la pression peuvent même apparaître comme présenté dans Pelletier et coll. (1989). Pourtant, les éléments finis à pression discontinue sont couramment utilisés depuis leur création, notamment dans le monde de l'industrie et donnent des solutions tout à fait acceptables. Ces considérations dépendent, en fait, beaucoup des critères de convergence et du nombre d'éléments utilisés pour le maillage. Les éléments finis les plus populaires approchant la pression de façon continue sont l'élément tétraédrique de

Taylor-Hood (P_2-P_1) et l'élément $P_1^+-P_1$ tétraédrique, également appelé MINI et présenté à la Figure 4-3. Tous les deux remplissent la condition de Brezzi-Babuska. Dans l'élément de Taylor-Hood, la vitesse est quadratique et la pression est linéaire. L'élément MINI est plus léger. Il est linéaire en vitesse et en pression et comporte de ce fait moins de degrés de liberté que l'élément précédent. Cet élément provient de l'élément d'ordre égal P_1-P_1 , qui ne satisfait pas la condition de Brezzi-Babuska. Pour cette raison, une bulle au barycentre du tétraèdre a été ajoutée afin de garantir la stabilité de l'élément MINI.

L'élément MINI comporte quatre degrés de liberté en vitesse et en pression à chaque noeud du tétraèdre. Trois degrés de liberté supplémentaires en vitesse correspondant à la fonction bulle sont ajoutés au barycentre.

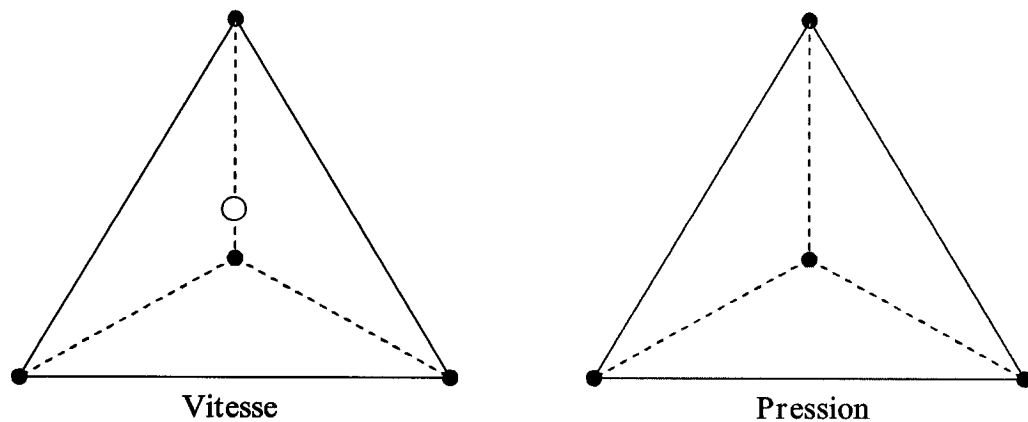


Figure 4-3 – Élément fini $P_1^+-P_1$ (MINI)

Puisque la fonction bulle est propre à chaque élément MINI, on peut éliminer les variables qui lui sont associées du système d'équations discrétisées résultant par condensation statique. Ce dernier point représente un avantage majeur de l'élément MINI par rapport à d'autres éléments. Il permet en effet de réaliser des gains en temps de calcul très intéressants d'un point de vue industriel. Ceci est d'autant plus vrai lorsque le maillage de la géométrie utilisé comporte de nombreux éléments. Une fois que la fonction bulle est condensée, l'élément MINI est similaire à un élément P_1 - P_1 stabilisé. Cependant, bien que l'élément MINI est plus compétitif en temps de calcul que l'élément de Taylor-Hood (P_2 - P_1), son approximation en pression est parfois sujette à des oscillations, voir Pierre et coll. (1988) et N'Dri et coll. (2006).

Depuis sa création (Arnold et coll., 1984) jusqu'à nos jours, l'élément MINI a été étudié par de nombreux auteurs (N'Dri et coll., 2002, 2006 ; Franca et coll., 2001 ; Gonzales et coll., 2004) et utilisé pour de nombreuses applications : comportement acoustique des matériaux poreux couplé à des phénomènes de surfaces libres (Braess et coll., 2000), simulation d'opérations chirurgicales (Pacini, 2005 ; Bermúdez et coll., 2006), remplissage de moule (Pichelin et coll., 1998 ; Kim et coll., 2006), simulations hémodynamiques (Urquiza et coll., 2006).

L'élément MINI sera privilégié dans cette étude pour discrétiser les équations [4-28], [4-29] et [4-30], en vitesse et en pression.

Nous rappelons la définition de l'espace discret de l'élément MINI. Tout d'abord, nous définissons la fonction de bulle. Pour un tétraèdre fixé $T \in \mathfrak{T}_h$, nous notons $\theta_1^T, \dots, \theta_4^T$ les coordonnées barycentriques dans T , où \mathfrak{T}_h est une discrétisation de Ω . La fonction bulle, notée α , associée à T , est définie par le produit:

$$\alpha = 256 \prod_{i=1}^4 \theta_i \quad [4-31]$$

Cette fonction bulle est un polynôme du degré quatre, nulle sur la surface du tétraèdre T et valant 1 en son barycentre.

L'espace d'approximation lié à l'élément MINI se compose des fonctions de base continues qui sont la somme de polynômes de degré un et de la fonction bulle. Le Tableau 4-1 présente les fonctions de base exprimées sur l'élément de référence (ξ, η, ζ) . L'espace d'approximation de l'élément MINI pour la vitesse discrète \mathbf{v}_h est défini par

$$\mathcal{M}_h(\Omega) = \left\{ \mathbf{v}_h \in [H^1(\Omega)]^3 ; \mathbf{v}_h|_T \in [\mathcal{P}_1(T) \oplus \mathcal{P}_b(T)]^3, \forall T \in \mathfrak{T}_h \right\}, \quad [4-32]$$

où $\mathcal{P}_1(T)$ représente l'espace des polynômes de degré 1 sur T et

$$\mathcal{P}_b(T) = \{a\alpha ; a \in \mathbb{R}\}. \quad [4-33]$$

La pression discrète p_h appartient à l'espace d'approximation

$$\mathcal{Q}_h(\Omega) = \{p_h \in L^2(\Omega) ; p_h|_T \in \mathcal{P}_1(T), \forall T \in \mathfrak{T}_h\}. \quad [4-34]$$

Tableau 4-1 – Fonctions de base de l'élément $P_1^+-P_1$ (MINI)

	Coordonnées	Fonctions de base
φ_1	(0, 0, 0)	$(1 - \xi - \eta - \zeta) - \frac{1}{4} \varphi_5$
φ_2	(1, 0, 0)	$\xi - \frac{1}{4} \varphi_5$
φ_3	(0, 1, 0)	$\eta - \frac{1}{4} \varphi_5$
φ_4	(0, 0, 1)	$\zeta - \frac{1}{4} \varphi_5$
φ_5	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$	$256 (1 - \xi - \eta - \zeta) \xi \eta \zeta$

4.4.3 Approximation des multiplicateurs de Lagrange pour les contraintes cinématiques

Le multiplicateur de Lagrange discret λ_h appartient à un espace d'approximation Λ_h qui est associé à la frontière Γ^* de l'objet fictif Ω^* . Si \mathcal{T}_h^* représente une discrétisation de Γ^* , un choix naturel pour $\Lambda_h \subset L^2(\Gamma^*)$ est

$$\Lambda_h(\Gamma^*) = \left\{ \lambda_h \in [L^2(\Gamma^*)]^3 ; \lambda_h|_T \in [\mathcal{P}_0(T)]^3, \forall T \in \mathcal{T}_h^* \right\}. \quad [4-35]$$

Il est à noter que dans ce cas, chacune des trois composantes du multiplicateur de Lagrange λ_h est approchée par des constantes dans chaque élément de \mathcal{T}_h^* . La principale difficulté rencontrée lors de l'utilisation de la méthode des domaines fictifs réside dans le fait que les intégrales de surface sur Γ^* sont très délicates à calculer (Glowinski, 1994) en particulier pour des problèmes en trois dimensions. Cette

opération nécessite en particulier de décomposer Γ^* en sous régions définies par l'intersection des triangles de \mathcal{T}_h^* et des tétraèdres \mathcal{T}_h . Bertrand et coll. (1998) ont présenté une approche différente, intitulée, la méthode des éléments finis virtuels. Dans celle-ci, les contraintes cinématiques $\mathbf{v}|_{\Gamma^*} = \mathbf{v}^*$ sont imposées sur des points, appelés points de contrôle. Considérons l'ensemble de points $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$ représentatifs des noeuds de la discrétisation de Γ^* . Le mode d'imposition des contraintes cinématiques, inspiré des méthodes de collocation proposée par Zienkiewicz (1977), est appliqué point par point, c'est à dire

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}_i) = \mathbf{v}^*(\mathbf{x}_i), \quad \forall i = 1, 2, \dots, N. \quad [4-36]$$

Du point de vue de la distribution, les contraintes présentées en [4-36] sont équivalentes à l'équation [4-30] si on prend des fonctions de Dirac pour les composantes de ξ_h :

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = \begin{cases} 1 & \text{if } \mathbf{x} = \mathbf{x}_i \\ 0 & \text{if } \mathbf{x} \neq \mathbf{x}_i \end{cases}. \quad [4-37]$$

Ce dernier point différencie la méthode des éléments finis virtuels de Bertrand et coll. (1997) de celle des domaines fictifs de Glowinski (1994). La méthode des éléments finis virtuels est moins exacte en ce sens que les contraintes cinématiques sont imposées d'une façon moins précise. Elle reste toutefois acceptable et est beaucoup

plus facile à implémenter. Dans la partie suivante, nous présentons deux nouvelles stratégies de résolution des équations [4-28] - [4-30]. L'une est basée sur celle de Bertrand et coll. (1997), l'autre est originale.

4.5 Stratégies de résolution

4.5.1 Introduction

Ici, notre intérêt est porté sur une méthode efficace pour résoudre le problème discret [4-28] - [4-30], obtenu par la méthode des domaines fictifs. L'élément MINI, couplé en vitesse et en pression, est utilisé pour discrétiser ces équations. Nous commençons par présenter une approche de résolution appliquée à cette situation et inspirée de la méthode de Bertrand et coll. (1997), puis nous présentons une nouvelle approche.

4.5.2 Approche découplée : méthode de pénalisation consistante pour (u, p)

La première méthode présentée ici est inspirée de celle de Bertrand et coll. (1997), appliquée à l'élément fini MINI. Elle consiste, dans un premier temps, à résoudre les équations d'échange en vitesse et en pression de façon simultanée, puis de mettre à jour les multiplicateurs de Lagrange de façon découplée.

4.5.2.1 Méthode de pénalisation constante pour (v, p)

Cette méthode est tout d'abord présentée pour le problème de Stokes [4-13] - [4-14], puis appliquée à la résolution des équations d'Euler-Lagrange correspondant à la méthode des domaines fictifs, soit les équations [4-25] à [4-27].

Ce type de méthode est basé sur l'interprétation que l'équation de continuité constitue une relation supplémentaire liant les composantes du champ des vitesses. Les méthodes de pénalisation sont très utilisées en modélisation d'écoulement par éléments finis. Elles permettent en effet d'éliminer la pression du système d'inconnues et donc de diminuer les temps de calcul associés aux simulations. Pour un problème de Stokes stationnaire, tel que présenté dans la section précédente, son principe consiste à remplacer l'équation de conservation de la masse, [4-14], par l'équation suivante, dite de pénalisation en pression :

$$b(v_h, \phi_h) = -\frac{1}{\varepsilon_p} (p_h, \phi_h), \quad \forall \phi_h \in L^2(\Omega), \quad [4-38]$$

où ε_p , est une quantité très grande, appelée paramètre de pénalisation. Dans [4-38], la divergence du champ des vitesses n'est plus égale à zéro, mais à une quantité extrêmement petite. Les équations [4-13] et [4-38] mènent ensuite au système matriciel :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & \varepsilon_p^{-1} \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{P} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}, \quad [4-39]$$

où \mathbf{A} est la matrice de diffusion, \mathbf{B}^T correspond à l'opérateur gradient, \mathbf{B} à l'opérateur divergence, \mathbf{F} est le vecteur associé aux forces externes et aux conditions aux limites. \mathbf{U} représente le vecteur inconnu associé au champ des vitesses nodales et \mathbf{P} est le vecteur inconnu contenant les pressions nodales. Il est à noter que les inconnues en vitesse correspondant aux degrés de liberté associés à la bulle de l'élément MINI ont préalablement été éliminées de la formulation par l'opération de condensation statique. Ceci permet de réduire la taille du problème matriciel et de diminuer ainsi de façon significative la durée du calcul.

Le problème [4-39] est linéaire et se résout directement. Dans le cas d'un problème de Navier-Stokes, des itérations seraient nécessaires.

D'autres part, le modèle obtenu par la méthode de pénalisation par éléments finis n'assure la condition d'incompressibilité du fluide que d'une manière approximative. C'est la raison pour laquelle, le choix du paramètre de pénalisation en pression ε_p doit être fait avec précaution. Les propriétés du fluide peuvent aussi accentuer les difficultés occasionnées lors de l'utilisation de la méthode de pénalisation, tel que discuté dans Pelletier et coll. (1989). En théorie, plus la valeur du paramètre est élevée, plus la condition d'incompressibilité est vérifiée précisément.

Toutefois, une valeur trop importante peut entraîner des phénomènes de blocage, dégrader le conditionnement du système matriciel ou entraîner des erreurs d'arrondis machine détériorant la qualité de la solution, (Pelletier et coll., 1989).

Reddy (1984) a proposé de prendre pour ce paramètre une valeur constante par élément, typiquement une puissance de dix. Dans certains cas, ce choix n'est toutefois pas suffisant. Zienkiewicz et coll. (1989) ont proposé de fixer ε_p selon la taille de maille h et la viscosité du fluide μ :

$$\varepsilon_p = f(h, \mu). \quad [4-40]$$

En particulier, ils ont choisi:

$$\varepsilon_p = \frac{10^{-\alpha} h}{\mu}, \quad [4-41]$$

où la valeur de α est trouvée heuristiquement à partir de cas tests.

Une autre difficulté qui peut être rencontrée en utilisant la méthode de pénalisation est le problème de la mise à l'échelle des termes de pression dans le système matriciel élémentaire. En effet, dans le problème [4-39], les blocs A et B peuvent avoir des ordres de grandeur très différents. Selon les paramètres du fluide étudié, les termes de pression associés au problème peuvent devenir prépondérants par rapport aux termes de viscosité. Cette particularité peut être à l'origine de différents

symptômes, caractéristiques d'une solution inexacte, comme par exemple la non conservation de la masse ou une valeur de perte de charge erronée.

Pour corriger ce problème, Pelletier et coll. (1989) ont proposé de faire une mise à l'échelle dans les équations d'échange en multipliant les blocs \mathbf{B} et \mathbf{B}^T par un scalaire κ de sorte que les termes de \mathbf{A} et \mathbf{B}^T ont le même ordre de grandeur. En pratique cette solution revient à faire les changements de variable suivant :

$$\tilde{\mathbf{B}} = \kappa \mathbf{B}, \quad [4-42]$$

$$\tilde{\mathbf{P}} = \frac{1}{\kappa} \mathbf{P}. \quad [4-43]$$

Le nouveau système élémentaire à résoudre est donné par

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \tilde{\mathbf{B}}^T \\ \tilde{\mathbf{B}} & \varepsilon_p^{-1} \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{U} \\ \tilde{\mathbf{P}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}. \quad [4-44]$$

La pression originale peut ensuite être facilement récupérée lors d'une étape de post-traitement à l'aide de [4-43]. Dans notre travail, la valeur de κ a été fixée constante par élément à une valeur de 10^{-5} .

4.5.2.2 Mise à jour des multiplicateurs de Lagrange de façon découplée

La deuxième étape dans la résolution du problème [4-23] obtenu par la méthode des domaines fictifs consiste à calculer les multiplicateurs de Lagrange λ_h . Cette

opération est effectuée de façon découplée à l'aide de l'algorithme d'Uzawa modifié par Bertrand et coll. (1997) pour la méthode des éléments finis virtuels.

Il en résulte l'algorithme suivant :

-
- 0. Pour $U^{(0)}$, $P^{(0)}$ et $\Lambda^{(0)}$ donnés:
 - 1. Pour $n = 0, 1, 2, \dots$, jusqu'à convergence:
 - 1.1. Résoudre simultanément pour δU et δP , le système:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & \varepsilon_p^{-1} \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \delta U \\ \delta P \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{R}_{U^{(n)}} \\ \mathbf{R}_{P^{(n)}} \end{Bmatrix} \quad [4-45]$$

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{R}_{U^{(n)}} \\ \mathbf{R}_{P^{(n)}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F} - \Lambda^{(n)} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & \varepsilon_p^{-1} \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} U^{(n)} \\ P^{(n)} \end{Bmatrix} \quad [4-46]$$

$$1.2. \text{ Mettre à jour } U^{(n)} \text{ et } P^{(n)} : \begin{cases} U^{(n+1)} = U^{(n)} + \delta U \\ P^{(n+1)} = P^{(n)} + \delta P \end{cases}$$

$$1.3 \text{ Résoudre pour } \Lambda^{(n+1)} : \quad \Lambda^{(n+1)} = \Lambda^{(n)} + \beta H U^{(n+1)}$$

Figure 4-4 – Algorithme de résolution pour la méthode des éléments finis virtuels de façon découplée

La grandeur β est un paramètre par la suite réglé à 1. La signification de H et $\Lambda^{(n)}$ peut facilement être déduite de l'équation [4-28].

Cette méthode nécessite plusieurs itérations pour converger en pratique. De plus, elle peut être généralisée aux équations de Navier-Stokes sans difficulté. Un algorithme de Picard ou de Newton-Raphson peut alors être introduit dans l'algorithme de la Figure 4-4 pour traiter la non linéarité due à la convection.

La partie suivante présente une méthode originale de résolution plus rapide que celle qui vient d'être introduite.

4.5.3 Approche totalement couplée en (u, p, λ)

La nouvelle approche de résolution développée ici s'inspire de la méthode de pénalisation consistante en pression présentée plus haut pour la résolution couplée d'un problème de Stokes. Dans cette partie, la résolution des multiplicateurs de Lagrange est effectuée de façon couplée, c'est-à-dire en même temps que celle pour la vitesse et la pression.

D'autre part, un degré de liberté associé à un point de contrôle appartient à un seul élément fini et peut être condensé, ce qui diminue la taille du système linéaire à résoudre.

Dans le problème [4-39], la méthode de pénalisation consistante en pression est utilisée pour assurer la contrainte d'incompressibilité de façon approximative. Ici, une

nouvelle méthode de pénalisation consistante en multiplicateurs de Lagrange λ est développée pour forcer les contraintes cinématiques associées au problème.

La formulation de la méthode de pénalisation en pression et en multiplicateurs de Lagrange appliqués aux équations [4-25], [4-26] et [4-27] remplace les équations [4-26] et [4-27] par :

$$b(v_h, \phi_h) = -\frac{1}{\varepsilon_p} (p_h, \phi_h), \quad \forall \phi_h \in L^2(\Omega), \quad [4-47]$$

$$((v_h - v^*), \xi_h)_{\Gamma^*} = -\frac{1}{\varepsilon_\lambda} (\lambda_h, \xi_h)_{\Gamma^*}, \quad \forall \xi_h \in [L^2(\Gamma^*)]^3, \quad [4-48]$$

où ε_p correspond au paramètre de pénalisation en pression associé à la contrainte d'incompressibilité. La grandeur ε_λ représente le paramètre de pénalisation en multiplicateurs de Lagrange correspondant aux contraintes cinématiques.

Le système matriciel associé aux équations [4-25], [4-47] et [4-48] est maintenant défini par :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T & \mathbf{K}_{\Lambda U}^T \\ \mathbf{B} & \varepsilon_p^{-1} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{\Lambda U} & \mathbf{0} & \varepsilon_\lambda^{-1} \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{P} \\ \Lambda \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{\Lambda U} \mathbf{U}^* \end{Bmatrix}. \quad [4-49]$$

Dans cette version, le terme Λ ne figure plus dans le vecteur des forces externes mais dans celui des degrés de liberté. Le bloc matriciel $\mathbf{K}_{\Lambda U}$ représente le couplage entre la vitesse et les multiplicateurs de Lagrange comme dans [4-25]:

$$(\mathbf{K}_{\Lambda U})_{ij} = (\varphi_i, \xi_j)_{\Gamma^*}. \quad [4-50]$$

La signification de \mathbf{U}^* se déduit de l'équation [4-48].

L'utilisation de cette méthode de pénalisation pour cette approche est soumise aux mêmes limitations que dans la partie précédente et exposées en premier par Reddy et coll. (1984) et Pelletier et coll. (1989). Ici elles sont encore plus contraignantes dans la mesure où les termes de pénalisation sont en plus grande proportion dans la matrice globale. La méthode de pénalisation en pression et en multiplicateurs de Lagrange peut donc avoir un impact significatif sur le conditionnement de la matrice selon la valeur des termes de pénalisation. Des phénomènes de blocage en viscosité ont même pu être constatés au cours de l'étude. Les paramètres de pénalisation ε_p et ε_λ sont responsables du bon fonctionnement de la méthode présentée ici. Une attention toute particulière doit donc leur être portée au moment de leurs définitions. Celle de ε_p a été effectuée dans la partie précédente. Pour le dimensionnement de ε_λ , la démarche de Zienkiewicz et coll. (1989) n'a pas été concluante. Une approche heuristique a donc été entreprise. Les formules de paramètres de pénalisation retenues sont :

$$\varepsilon_p = \frac{10^{-\alpha} h}{\mu}, \quad [4-51]$$

$$\varepsilon_\lambda = \frac{10^{-\beta}}{\mu}. \quad [4-52]$$

Les valeurs de α et β ont été déterminées à partir de nombreux cas-tests. Il apparaît que la méthode fonctionne de façon optimale lorsque α et β sont réglés à 16 et 9, respectivement, pour des problèmes de type Stokes.

La version matricielle de l'algorithme de résolution pour le problème [4-25], [4-47] et [4-48], consistant à calculer les variables \mathbf{U} , \mathbf{P} et Λ est maintenant présentée:

0. Pour $\mathbf{U}^{(0)}$, $\mathbf{P}^{(0)}$ et $\Lambda^{(0)}$ donnés.
1. Pour $n = 0, 1, 2, \dots$, jusqu'à convergence:
 - 1.1. Résoudre simultanément en $\delta\mathbf{U}$, $\delta\mathbf{P}$ et $\delta\Lambda$ le système:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T & \mathbf{K}_{\Lambda\mathbf{U}}^T \\ \mathbf{B} & \varepsilon_p^{-1} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{\Lambda\mathbf{U}} & \mathbf{0} & \varepsilon_\lambda^{-1} \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta\mathbf{U} \\ \delta\mathbf{P} \\ \delta\Lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{\mathbf{U}^{(n)}} \\ \mathbf{R}_{\mathbf{P}^{(n)}} \\ \mathbf{R}_{\Lambda^{(n)}} \end{bmatrix} \quad [4-53]$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{R}_{\mathbf{U}^{(n)}} \\ \mathbf{R}_{\mathbf{P}^{(n)}} \\ \mathbf{R}_{\Lambda^{(n)}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{\Lambda\mathbf{U}} \mathbf{U}^* \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T & \mathbf{K}_{\Lambda\mathbf{U}}^T \\ \mathbf{B} & \varepsilon_p^{-1} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{\Lambda\mathbf{U}} & \mathbf{0} & \varepsilon_\lambda^{-1} \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}^{(n)} \\ \mathbf{P}^{(n)} \\ \Lambda^{(n)} \end{bmatrix} \quad [4-54]$$

$$1.2. \text{ Mettre à jour } \mathbf{U}^{(n)}, \mathbf{P}^{(n)} \text{ et } \Lambda^{(n)}: \begin{cases} \mathbf{U}^{(n+1)} = \mathbf{U}^{(n)} + \delta \mathbf{U} \\ \mathbf{P}^{(n+1)} = \mathbf{P}^{(n)} + \delta \mathbf{P} \\ \Lambda^{(n+1)} = \Lambda^{(n)} + \delta \Lambda \end{cases}$$

Figure 4-5 – Nouvel algorithme de résolution de la méthode des éléments finis virtuels

La partie suivante propose une application de la méthodologie qui vient d'être présentée.

CHAPITRE 5 MODÉLISATION NUMÉRIQUE DU PROCÉDÉ DE MALAXAGE TRIPALE À MOUVEMENT PLANÉTAIRE PAR UNE APPROCHE DES DOMAINES FICTIFS

5.1 Présentation de l'article

Cet article a été soumis à l'*International Journal for Numerical Methods in Fluids*. Il présente une nouvelle stratégie de résolution pour la méthode des domaines fictifs à lagrangiens distribués, aussi appelée méthode des éléments finis virtuels, appliquée à des problèmes de mélange. Celle-ci permet en particulier de réaliser des simulations en trois dimensions de la phase de malaxage du propergol dans des délais répondant aux exigences industrielles. La méthode de résolution se base sur une approche couplée en vitesse, pression et multiplicateurs de Lagrange par une méthode de pénalisation consistante. Parallèlement, dans cette étude, les équations de la conservation de la matière et de la quantité de mouvement sont discrétisées avec l'élément fini MINI. Cet élément est linéaire en vitesse et en pression. Le champ des vitesses est enrichi par une bulle au centre du tétraèdre. Cette bulle peut être éliminée par condensation statique, ce qui rend l'élément MINI très compétitif en temps de calcul, surtout pour des simulations numériques transitoires tridimensionnelles.

Après un rappel de la méthode des éléments finis virtuels, la nouvelle approche de résolution sera présentée. Puis sa précision sera étudiée pour le cas du mélangeur Maxblend avec et sans chicanes, en comparant les consommations de puissance avec des données expérimentales. Enfin, la méthode sera appliquée à la simulation d'un procédé industriel de malaxage en trois dimensions par un mélangeur tripale à mouvement planétaire. Les résultats obtenus seront comparés à ceux déjà existants, obtenus avec une approche de résolution découplée.

5.2 A fast and robust fictitious domain method for modelling viscous flows in complex mixers

A fast and robust fictitious domain method for modelling viscous flows in complex mixers

Benjamin Coesnon^{a,b}, Mourad Heniche^{a,b}, Christophe Devals^a, François Bertrand^{a,b,1},
Philippe A. Tanguy^{a,b}

a) Research Unit for Industrial Flows Processes (URPEI)

b) Center for Applied Research on Polymers and Composites (CREPEC)

Department of Chemical Engineering, Ecole Polytechnique de Montreal,

P.O. Box 6079, Stn. Centre-Ville, Montreal, QC, H3C 3A7, Canada

¹ Correspondence to : F. Bertrand, Department of Chemical Engineering, Ecole Polytechnique de Montreal, P.O. Box 6079, Stn. Centre-ville, Montreal, QC, Canada, H3C 3A7. E-mail: francois.bertrand@polymtl.ca

5.2.1 Summary

This work deals with the development of a fast three-dimensional numerical strategy for the simulation of viscous fluid flow in complex mixing systems. The proposed method is based on a distributed Lagrange multiplier fictitious domain method and the use of the low cost MINI finite element. Contrary to the previous fictitious domain method developed by our group a few years ago, the underlying partial differential equations are solved here in a coupled manner using a consistent penalty technique. The method is discussed in detail and its precision is assessed by means of experimental data in the case of an agitated vessel. A comparison is also made with our existing fictitious domain method and its decoupled Uzawa-based solver. Our new technique is then applied to the simulation of the flow of a Newtonian viscous fluid in a three-blade planetary mixer in the context of the production of solid propellants.

KEY WORDS: CFD; fictitious domain method; finite element method; laminar; Maxblend; MINI element; mixing; planetary mixer

5.2.2 Introduction

The mixing of very viscous fluids in mechanically agitated vessels is a common operation in numerous industries. One example is the mixing of very fine solids at high loading rates in a viscous polymeric matrix, which finds applications in the production

of propellant pastes for aerospace and automobile industries. These materials are prepared through fabrication cycles that are complex, costly and time consuming. As discussed in Tanguy *et al.* (1999), the manufacturing line is subjected to two central difficulties:

- the fluid is paste-like and highly viscous. Hence the mixing is achieved in laminar regime;
- small quantities in the formulation must be thoroughly distributed and dispersed to yield the right mechanical and combustion properties.

The operation of blending very viscous pastes may be achieved by four different mixing systems: vertical planetary kneaders, horizontal multiple impeller kneaders, helical ribbon impellers and twin-screw extruders. Since the mid 60s, solid rocket propellant mixing has been often carried out through vertical planetary mixers.

The analysis of mixer performance can be done through the evaluation of macroscopic quantities such as mixing time or power draw. Evaluating these quantities experimentally is a time-consuming and expensive task. 3D CFD simulation then appears as a useful alternative for the investigation of a mixing process. However, the biggest challenge for the modelling of mixing with a planetary mixer such as the three-blade planetary kneader is that the geometry contains moving parts with complex kinematics, which entails the generation of a new mesh at every time iteration when using standard CFD (finite element or finite volume) techniques.

In the literature, several numerical simulation techniques within the finite element method framework have been proposed to eliminate the need for repetitive remeshings.

Bertrand *et al.* (1997) introduced the virtual finite element method (VFEM), a fictitious domain method that is based upon optimization techniques as first proposed by Glowinski *et al.* (1994). In the context of fluid flow in agitated tanks, the internal blades are discretized using control points on which kinematics constraints are imposed and introduced in the equations of change by means of Lagrange multipliers. Bertrand *et al.* (1994) and Tanguy *et al.* (1995, 1996, 1998, 1999) used the VFEM technique to simulate mixing flows in a twin-blade planetary mixer. Each time, the numerical results were in very good agreement with experimental data.

Jongen (2000) and Jongen *et al.* (2003) used a modified version of the VFEM implemented in FIDAP (ANSYS) for characterizing mixing flows in various batch mixers, one of which was a planetary mixer. More particularly, they studied the influence of mixer configurations and operating conditions on the shear rate exerted on viscous pastes.

Avalosse *et al.* (1997) proposed the so-called mesh superposition technique (MST). In this method, a static mesh representing the motionless part of the flow domain and one additional dynamic mesh are superimposed at every time step of a transient simulation. The velocity of these moving parts is taken into account in the equations of change by a penalty formulation. This method has been used in Polyflow (ANSYS) to model the flow of a viscous fluid in a twin-screw extruder in 2D

(Avalosse *et al.*, 1997) and in 3D (Avalosse *et al.*, 2002). More recently, Connelly and Kokini (2006) used the MST to simulate the three-dimensional flow of a viscous fluid in a sigma blade mixer.

Also of interest is the work of Clifford *et al.* (2004) who investigated experimentally the effect of the Reynolds number on a planetary mixer. Finally, Delaplace *et al.* (2005, 2007) presented a dimensional analysis for the flow in a TRIAXE[®] system consisting of a pitched blade turbine mounted on two almost perpendicular rotational axes.

All the methods mentioned above belong to the class of fictitious domain methods and are well-adapted to the treatment of complex geometries with evolving topologies. They are however rather time-consuming, in particular if they are to be used for industrial applications.

The objective of this paper is to introduce a variant of the VFEM that we introduced a few years ago (Bertrand *et al.*, 1997), and to show that it is both fast and robust for the simulation of viscous fluid flow in complex mixing systems such as the planetary mixers. This distributed Lagrange multiplier fictitious domain method is based on the use of the inexpensive MINI finite element and, contrary to our previous fictitious domain method (VFEM) and its decoupled Uzawa solver, it resorts to a consistent penalty technique for solving the underlying partial differential in a coupled manner.

First, the method is presented in detail. Next, its precision is assessed by means of experimental data that were obtained in the case of a Maxblend mixer, with and

without baffles. A comparison is also made with our existing VFEM. Finally, our new technique is applied to the simulation of the flow of a Newtonian viscous fluid, typical of a solid propellant, in an industrial three-blade planetary mixer. The solutions obtained are all discussed in terms of both accuracy and CPU time.

5.2.3 Equations of change

The flow of an incompressible viscous flow in a computational domain Ω with boundary Γ containing a moving part Ω^* , as presented in Figure 5-1, is governed by the momentum and continuity equations:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{grad} \mathbf{v} \right) + \mathbf{div} \boldsymbol{\tau} + \mathbf{grad} p = \mathbf{f}, \quad \text{in } \Omega, \quad [5-1]$$

$$\mathbf{div} \mathbf{v} = 0, \quad \text{in } \Omega, \quad [5-2]$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^*, \quad \text{on } \Gamma^*, \quad [5-3]$$

where Γ^* is the boundary of Ω^* and where [5-3] can be viewed as a kinematic constraint to be satisfied by the solution.

In these equations, \mathbf{v} is the velocity, \mathbf{v}^* the prescribed velocity on the moving part, \mathbf{f} a body force, p is the pressure and ρ the fluid density. The stress tensor $\boldsymbol{\tau}$ is a function of the rate-of-strain tensor $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$, as expressed by a rheological equation of state:

$$\boldsymbol{\tau} = -2\eta(|\dot{\boldsymbol{\gamma}}|)\dot{\boldsymbol{\gamma}}, \quad [5-4]$$

with,

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}} = \frac{1}{2}[\boldsymbol{grad} \mathbf{v} + (\boldsymbol{grad} \mathbf{v})^T]. \quad [5-5]$$

In this work the Newtonian model is considered:

$$\eta(|\dot{\gamma}|) = \mu \quad [5-6]$$

Appropriate initial conditions and boundary conditions on Γ must also be applied for mathematical well-posedness.

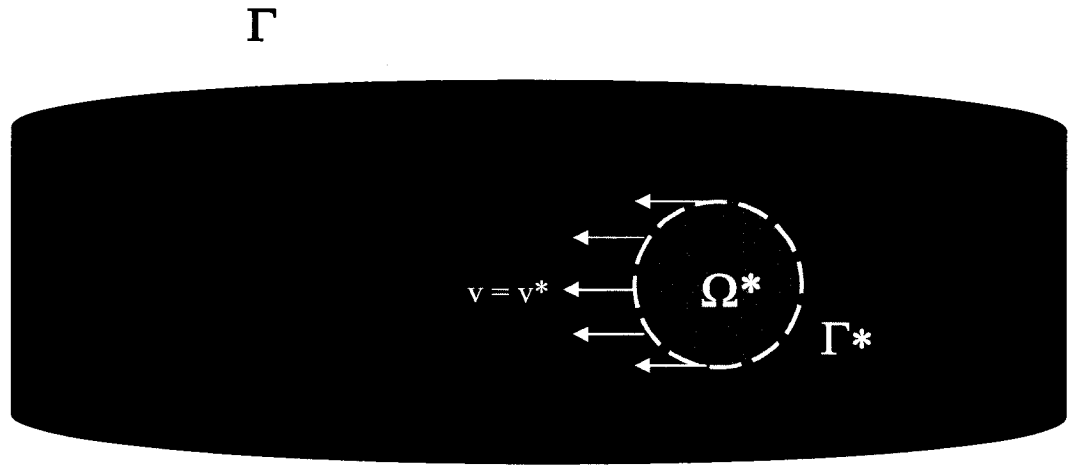


Figure 5-1 – Computational domain Ω with an internal part Ω^* of boundary Γ^*

5.2.4 Numerical strategy

For three-dimensional fluid flow problems involving internal moving parts, the VFEM considers the moving objects in the computational domain as a set of control points on which kinematics constraints are applied. These are then enforced in the equations of change by the use of Lagrange multipliers and constrained optimisation techniques. If we first consider the application of this method to a steady-state Stokes

problem (omitting the acceleration and inertia terms in [5-1]), the following saddle-point problem results:

$$\inf_{\mathbf{v} \in [H_0^1(\Omega)]^3} \sup_{p \in L^2(\Omega)} \sup_{\boldsymbol{\lambda} \in [L^2(\Gamma^*)]^3} L_{rs}^*(\mathbf{v}, p, \boldsymbol{\lambda}), \quad [5-7]$$

where $\boldsymbol{\lambda} \in [L^2(\Gamma^*)]^3$ is the Lagrange multiplier representing the kinematics conditions on the boundary Γ^* of the internal moving part, and where L_{rs}^* corresponds to the Lagrangian:

$$L_{rs}^*(\mathbf{v}, p, \boldsymbol{\lambda}) = L_r(\mathbf{v}, p) - \int_{\Gamma^*} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}^*) d\Gamma + \frac{S}{2} \int_{\Gamma^*} |\mathbf{v} - \mathbf{v}^*|^2 d\Gamma, \quad [5-8]$$

$$L_r(\mathbf{v}, p) = \frac{\mu}{2} \int_{\Omega} |\text{grad } \mathbf{v}|^2 d\Omega - \int_{\Omega} p \text{div } \mathbf{v} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \frac{r}{2} \int_{\Omega} |\text{div } \mathbf{v}|^2 d\Omega \quad [5-9]$$

The Euler-Lagrange equations corresponding to this problem are given

$$\mathbf{a}(\mathbf{v}, \boldsymbol{\psi}) = (\mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}) + \mathbf{b}(\boldsymbol{\psi}, p) + (\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\psi})_{\Gamma^*}, \quad \forall \boldsymbol{\psi} \in [H_0^1(\Omega)]^3, \quad [5-10]$$

$$\mathbf{b}(\mathbf{v}, \phi) = 0, \quad \forall \phi \in L^2(\Omega), \quad [5-11]$$

$$((\mathbf{v} - \mathbf{v}^*), \boldsymbol{\xi})_{\Gamma^*} = 0, \quad \forall \boldsymbol{\xi} \in [L^2(\Gamma^*)]^3, \quad [5-12]$$

where

$$\mathbf{a}(\mathbf{v}, \boldsymbol{\psi}) = \mu \int_{\Omega} \text{grad } \mathbf{v} \cdot \text{grad } \boldsymbol{\psi} d\Omega, \quad [5-13]$$

$$\mathbf{b}(\mathbf{v}, \phi) = \int_{\Omega} \phi \cdot \text{div } \mathbf{v} d\Omega, \quad [5-14]$$

and $(\cdot, \cdot)_{\Omega}$ is the standard scalar product in $L^2(\Omega)$:

$$(u, v)_{\Omega} = \int_{\Omega} u \cdot v \, d\Omega, \quad \forall u, v \in L^2(\Omega). \quad [5-15]$$

Note that the inertia term can be added formally to [5-10] if needed. More details about the VFEM can be found in Bertrand et al. (1997).

In the present work, the low-order $P_1^+ - P_1$ (MINI) tetrahedral element is used to approximate the velocity $v_h \in V_h$ and the pressure $p_h \in P_h$. It is a stable element owing to the addition of a bubble function that can be eliminated by static condensation to reduce CPU time (Arnold et al., 1984). The Lagrange multiplier $\lambda_h \in \Lambda_h$ is discretized using Dirac shape functions following Bertrand et al. (1997). The solution of the system of equations [5-10] - [5-12] can be carried out by means of two different techniques.

5.2.4.1 Decoupled approach

In Bertrand et al. (1997), the equations [5-10] - [5-12] were solved in a fully decoupled manner using the Uzawa method. To speed up the solution process, it is proposed in the current work to resort to a partial decoupled approach, wherein the velocity and pressure are solved for in a coupled manner through a penalty technique, and the Lagrange multiplier is obtained as in Bertrand et al. (1997) through the Uzawa algorithm. This strategy implies that [5-11] is replaced by

$$b(v_h, \phi_h) = -\frac{1}{\varepsilon_p} (p_h, \phi_h), \quad \forall \phi_h \in P_h, \quad [5-16]$$

where ε_p , a large number, is the penalty parameter in pressure. Poor choices of ε_p can have a severe consequence on the validity of the computed solution. The choice of this

parameter is submitted to limitations, as discussed in Reddy (1984), Pelletier et al. (1989) and Langtangen et al. (2002). The overall algorithm in its matrix form is given in Figure 5-2, where the meaning of the different terms can be deduced straightforwardly from [5-10] - [5-12]. Note that, in practice, the role of the loop (in n) is two-fold as it serves to converge the Lagrange multiplier but can also be used to implement a fixed-point method (or Newton's scheme) when the inertia term is added to the momentum equation [5-10].

0. Given $\mathbf{U}^{(0)}$, $\mathbf{P}^{(0)}$ and $\Lambda^{(0)}$.
1. For $n = 0, 1, 2, \dots$, until convergence:
 - 1.1. Solve simultaneously for $\delta\mathbf{U}$ and $\delta\mathbf{P}$:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & \epsilon_p^{-1} \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \delta\mathbf{U} \\ \delta\mathbf{P} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{R}_{\mathbf{U}^{(n)}} \\ \mathbf{R}_{\mathbf{P}^{(n)}} \end{Bmatrix}$$

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{R}_{\mathbf{U}^{(n)}} \\ \mathbf{R}_{\mathbf{P}^{(n)}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F} - \Lambda^{(n)} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & \epsilon_p^{-1} \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{U}^{(n)} \\ \mathbf{P}^{(n)} \end{Bmatrix}$$

$$1.2. \text{ Update } \mathbf{U}^{(n)} \text{ and } \mathbf{P}^{(n)} : \begin{cases} \mathbf{U}^{(n+1)} = \mathbf{U}^{(n)} + \delta\mathbf{U} \\ \mathbf{P}^{(n+1)} = \mathbf{P}^{(n)} + \delta\mathbf{P} \end{cases}$$

$$1.3 \text{ Solve for } \Lambda^{(n+1)} : \quad \Lambda^{(n+1)} = \Lambda^{(n)} + \beta \mathbf{H} \mathbf{U}^{(n+1)}$$

Figure 5-2 – Solution algorithm for the virtual finite element method and the decoupled approach

This solution strategy has been used in our group to simulate fluid flow in mixing systems on a variety of impellers in satisfactory manners (Rivera et al. 2006 and

Barailler et al. 2006). It appears that one limitation is that the Uzawa algorithm requires a large number of fixed point iterations to converge. This observation has provided the impetus for the development of a fully coupled solution strategy, which is introduced next.

5.2.4.2 Fully coupled approach

With the fully coupled approach method the velocity \mathbf{v}_h , the pressure p_h and the Lagrange multiplier λ_h are all solved simultaneously by penalisation. Accordingly, equations [5-11] - [5-12] are replaced by

$$b(\mathbf{v}_h, \phi_h) = -\frac{1}{\varepsilon_p} (p_h, \phi_h), \quad \forall \phi_h \in P_h, \quad [5-17]$$

$$((\mathbf{v}_h - \mathbf{v}^*), \xi_h)_{\Gamma^*} = -\frac{1}{\varepsilon_\lambda} (\lambda_h, \xi_h)_{\Gamma^*}, \quad \forall \xi_h \in \Lambda_h \quad [5-18]$$

where ε_p and ε_λ are penalty parameters. The resulting overall algorithm in its matrix form is given in Figure 5-3. Here again, the meaning of the different terms can be deduced easily from equations [5-10] - [5-12]. Note that, contrary to the decoupled approach, the loop (in n) is only required when the inertia term is added to the momentum equation [5-10] in order to implement a fixed-point method or Newton's scheme.

The two solution strategies presented in this section were implemented in finite element software POLY3DTM from Rheosoft Inc. The relative accuracy and speed of

the new MINI-based VFEM will next be assessed through experimental data obtained for mixing systems. Before, a quick discussion about mixing characterization is presented.

0. Given $\mathbf{U}^{(0)}$, $\mathbf{P}^{(0)}$ and $\Lambda^{(0)}$.

1. For $n = 0, 1, 2, \dots$, until convergence:

1.1. Solve simultaneously for $\delta\mathbf{U}$, $\delta\mathbf{P}$ and $\delta\Lambda$:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T & \mathbf{K}_{\Lambda\mathbf{U}}^T \\ \mathbf{B} & \boldsymbol{\varepsilon}_p^{-1} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{\Lambda\mathbf{U}} & \mathbf{0} & \boldsymbol{\varepsilon}_\lambda^{-1} \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{P} \\ \Lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{\mathbf{U}^{(n)}} \\ \mathbf{R}_{\mathbf{P}^{(n)}} \\ \mathbf{R}_{\Lambda^{(n)}} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{R}_{\mathbf{U}^{(n)}} \\ \mathbf{R}_{\mathbf{P}^{(n)}} \\ \mathbf{R}_{\Lambda^{(n)}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{\Lambda\mathbf{U}} \mathbf{U}^* \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T & \mathbf{K}_{\Lambda\mathbf{U}}^T \\ \mathbf{B} & \boldsymbol{\varepsilon}_p^{-1} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{\Lambda\mathbf{U}} & \mathbf{0} & \boldsymbol{\varepsilon}_\lambda^{-1} \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}^{(n)} \\ \mathbf{P}^{(n)} \\ \Lambda^{(n)} \end{bmatrix}$$

$$1.2. \text{ Update } \mathbf{U}^{(n)}, \mathbf{P}^{(n)} \text{ and } \Lambda^{(n)}: \begin{cases} \mathbf{U}^{(n+1)} = \mathbf{U}^{(n)} + \delta\mathbf{U} \\ \mathbf{P}^{(n+1)} = \mathbf{P}^{(n)} + \delta\mathbf{P} \\ \Lambda^{(n+1)} = \Lambda^{(n)} + \delta\Lambda \end{cases}$$

Figure 5-3 – Solution algorithm for the virtual finite element method and the fully coupled approach

5.2.5 Mixing characterisation

One macroscopic quantity that is often used to characterize a mixing system is the power consumption P of the impeller, which can be calculated through an energy balance over the computational domain:

$$P = \int_{\Omega} \tau : \dot{\gamma} \, d\Omega. \quad [5-19]$$

In the field of mixing, it is also common to compare different impellers on the basis of their dimensionless K_p number, the value of which is constant in the laminar regime. It is defined as

$$K_p = \frac{P}{\mu N^2 D^3}, \quad [5-20]$$

where N the impeller rotational speed and D its diameter. Introducing the Reynolds number

$$Re = \frac{\rho N D^2}{\mu}, \quad [5-21]$$

the following expression for K_p can be established:

$$K_p = Re \, Np, \quad [5-22]$$

where

$$Np = \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad [5-23]$$

is the dimensionless power number. In practice, K_p can be evaluated by a regression technique on a set of (Re, Np) data points obtained experimentally or via CFD.

5.2.6 Accuracy of the MINI-based VFEM

In this section, the accuracy and speed of the MINI element will first be assessed with a standard finite element method in the case of a vessel mechanically agitated with a Maxblend impeller without baffles using experimental data as well as numerical results obtained with another finite element type, the discontinuous pressure P_1^+ - P_0 element. Next, the performance of the new MINI-based VFEM of the previous section will be investigated by comparing the results obtained with it to experimental data and to those obtained with the P_1^+ - P_0 element. The reader is referred to Fradette *et al.* (2007) and Iranshahi *et al.* (2007) for more details about this mixing system, and to Bertrand *et al.* (1992) for a description of the P_1^+ - P_0 element.

The Maxblend mixer, shown in Figure 5-4, is composed of a bottom paddle on which lies a grid-like structure. The paddle has been designed to generate efficient flow circulation while the role of the grid is to provide good dispersing capability in the case of a second phase. The Maxblend impeller represents an interesting alternative to close-clearance impellers. Table 5-1 summarizes the dimensions of the 190-liter mixing system considered in this work.

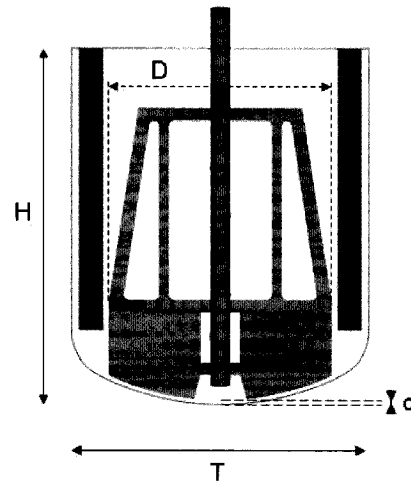


Figure 5-4 - Schematic of the Maxblend impeller in a baffled configuration

Table 5-1 - Dimensions of the Maxblend impeller

Tank	Impeller	Bottom gap
$T=0,60 \text{ m}$		
$H=0,72 \text{ m}$	$D=0,45 \text{ m}$	$c=10 \text{ mm}$
$w=0,047 \text{ m}$		

First, the accuracy of the MINI element is investigated with a standard finite element method. For this purpose, the Maxblend impeller system is considered in an unbaffled configuration in the case of Newtonian fluids flowing in laminar regime. For the solution of this problem, it was decided to consider the viewpoint of an observer attached to the moving impeller. As explained by Tanguy et al. (1992), the use of this

Lagrangian frame of reference makes the imposition of the boundary conditions much easier on a finite element mesh. The boundary conditions are defined by:

1. a no-slip condition on the impeller ;
2. the rotational speed ω on the vessel walls ;
3. the surface of the fluid is considered flat.

As the frame of reference is non-Galilean (the observer is in rotation with the impeller), the Navier-Stokes equations must be complemented by the centrifugal and Coriolis forces. This frame of reference yields a steady-state fluid flow problem that is faster to solve than a transient one, provided the flow is fully periodic.

For the simulations, the angular velocity ω was kept constant at 30 rpm and the Newtonian fluid had a density ρ of 1350 kg/m³ and a viscosity μ varying from 10 Pa.s to 136 Pa.s.

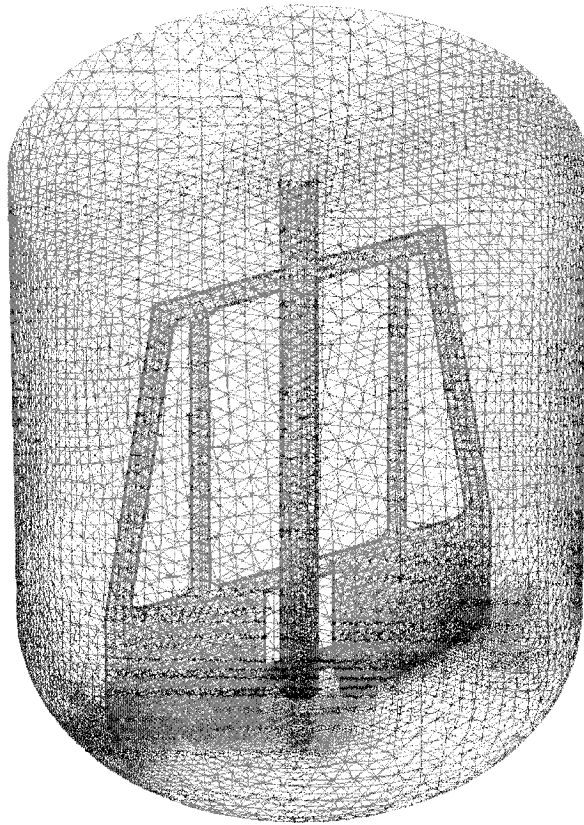


Figure 5-5 - Mesh of the Maxblend in an unbaffled configuration

The computational domain was discretized into 290, 336 tetrahedra using I-DEAS (EDS) (Figure 5-5). Solutions obtained with the standard finite element method and the discontinuous pressure P_1^+ - P_0 element will be used for comparison purposes. Consequently, Table 5-2 gives the characteristics of the meshes generated for both the MINI and the P_1^+ - P_0 elements. Note that care was taken so that these meshes were fine enough to yield mesh-independent results. A special non-uniform meshing strategy was required for modelling in a suitable way the low clearance between the vessel wall and the impeller. More precisely, a fine mesh was generated close to the bottom gap region

between the impeller and the tank walls where the highest shear rates are found. A coarser mesh was used elsewhere. It can be noticed that, in the case of MINI element, the number of equations, after static condensation of the velocity degrees of freedom located at the centroid of each finite element, is approximately one order of magnitude smaller than that with the $P_1^+-P_0$ element.

Table 5-2 - Characteristics of the meshes generated for the Maxblend impeller system in an unbaffled configuration

Finite element	Number of elements	Number of nodes	Number of equations
$P_1^+-P_1$ (MINI)	290 336	346 193	0.2 M
$P_1^+-P_0$	290 336	941 549	2.12 M

Simulations were performed on an IBM p690 computer and power draw values were computed from the velocity fields obtained using [5-19]. Figure 5-6 - Numerical and experimental power curves for the Maxblend impeller in an unbaffled configuration compares the numerical power curves obtained with the $P_1^+-P_0$ and MINI elements to the experimental data of Fradette *et al.* (2006). First, it can be readily noticed that each numerical power curve is in good agreement with the experimental data. These results also comply with the mixing theory, which states that, in the laminar regime ($Re < 10$), the power curve exhibits a slope of -1 on a log-log scale. Next, the

numerical K_p values computed are 170 and 176 with the MINI and $P_1^+-P_0$ elements, respectively, which are very close to the value of 180 obtained experimentally. These results are summarized in

Table 5-3 that also gives the average CPU time for the simulations.

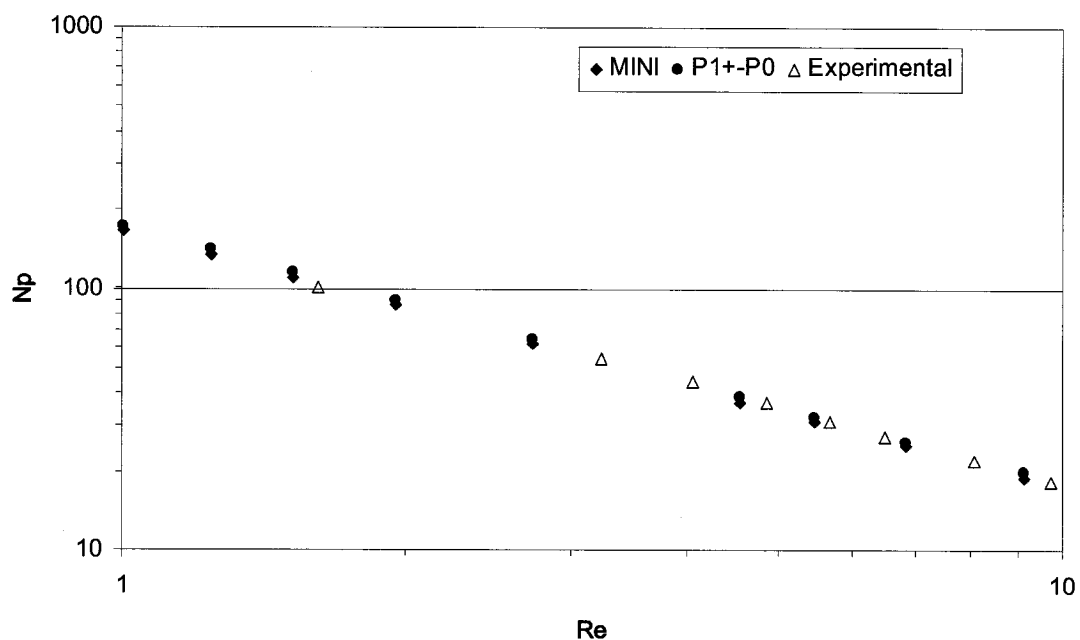


Figure 5-6 - Numerical and experimental power curves for the Maxblend impeller in an unbaffled configuration

These CPU times indicate that the MINI element is 20 times faster than the discontinuous pressure $P_1^+-P_0$ element for an almost equivalent accuracy, which makes it very attractive for industrial applications.

Table 5-3 – Simulations results for the Maxblend impeller in an unbaffled configuration

Type of results	Average CPU time per simulation (min)	K_p	Error with the experimental K_p (%)
Experimental	-	180	-
$P_1^+ - P_0$	120	176	2
$P_1^+ - P_1$ (MINI)	6	170	6

The accuracy of the MINI-based VFEM is next studied. For this purpose, 4 baffles were added to the Maxblend mixer described above, which renders the fluid flow problem unsteady and forces the use of the VFEM to avoid the need for repetitive remeshings. A Lagrangian frame of reference, that of the impeller, was used, meaning that the baffles are in motion. Viscous fluids identical to those described previously were considered, the flow of which is laminar and obeys the time-dependent Stokes equations, that is equation [5-1] without the inertia term.

The corresponding boundary conditions are as follows:

1. a no-slip condition on the Maxblend impeller ;
2. the rotational speed on the baffles ;
3. the rotational speed ω on the vessel walls ;
4. the surface is considered flat.

The fluid was supposed at rest at $t = 0$. From a numerical standpoint, the mesh generated previously for the unbaffled configuration was used here in the VFEM to represent the vessel and the impeller. A set of 6,432 control points was generated using I-DEAS (EDS) to take into account the 4 baffles (Figure 5-7). Note that the number of control points was adjusted with respect to the number of finite elements, as explained in Bertrand *et al.* (1997), so that the resulting problem does not become overconstrained.

The value of the time step for a simulation with the virtual finite element method is known to affect the accuracy of the solution and the stability of the model. For more details about this point, we refer the reader to Iranshahi *et al.* (2006). In practice, a trade-off between CPU time and accuracy must be used. Here, the time step was set to 0.1s. Each simulation was performed for three full revolutions. Table 5-4 - Simulation results for the Maxblend impeller system a baffled configuration summarizes the CPU time required for a transient simulation with the VFEM. Results in the case of the MINI element refer to the VFEM and the fully coupled solver, whereas those for the discontinuous pressure $P_1^+ - P_0$ element were obtained with the VFEM and the decoupled approach. As can be seen, the MINI-based VFEM introduced in this work outperforms the $P_1^+ - P_0$ /VFEM combination in terms of CPU time by a factor of 30.

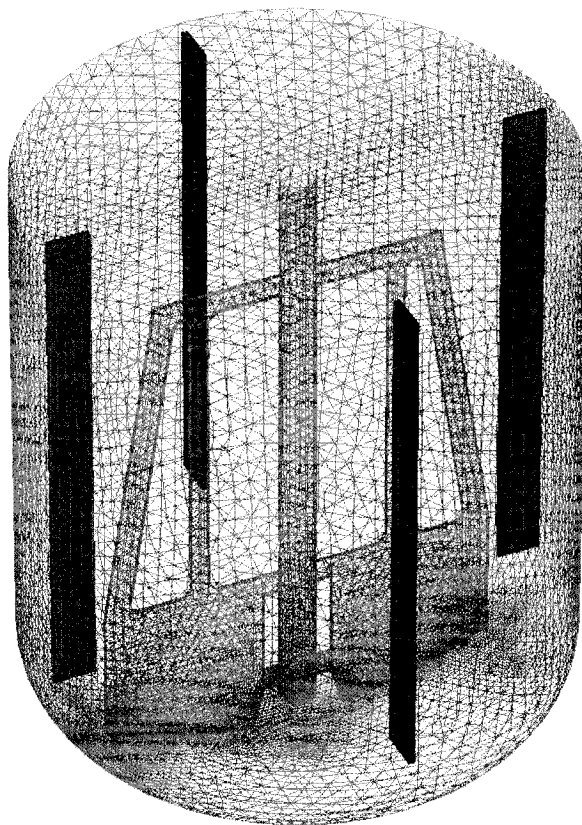


Figure 5-7 - Mesh of the Maxblend impeller in a baffled configuration

Table 5-4 - Simulation results for the Maxblend impeller system a baffled configuration

Type of results	Average CPU time	K_p	Discrepancy with respect to the experimental K_p (%)
Experimental	-	218	-
$P_1^+ - P_0$	2½ days	198	9
$P_1^+ - P_1$ (MINI) <i>fully coupled</i>	2h	194	11

As for accuracy, Figure 5-8 compares the numerical power curves to the experimental data of Fradette *et al.* (2007). The experimental K_p value is 218. As in the previous case, each power curve exhibits a slope of -1 on a log-log scale in the laminar regime ($Re < 10$). The numerical K_p values computed with the MINI and the $P_1^+-P_0$ elements are 198, 194, respectively. This corresponds to a similar discrepancy of around 10% in both cases. In particular, it shows the efficiency of the MINI-based VFEM for the simulation of viscous fluid flow in industrial mixing applications.

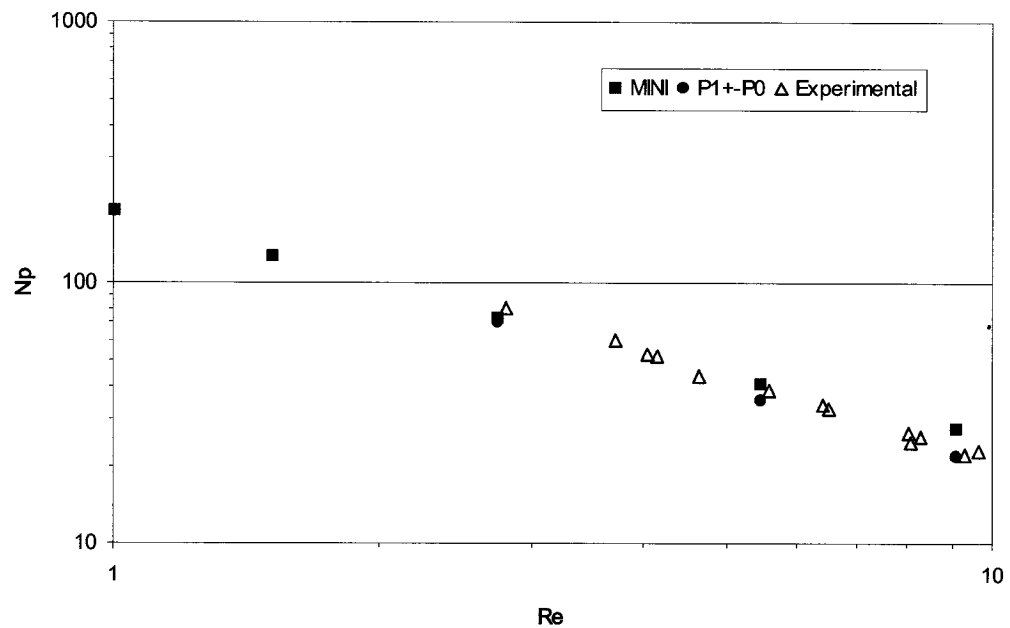


Figure 5-8 - Numerical and experimental power curves for the Maxblend impeller in a baffled configuration

5.2.7 Industrial flow in a three-blade planetary mixer

The new MINI-based VFEM is now applied to the industrial case of the laminar flow of a propellant-type highly viscous fluid in a three-blade planetary mixer. Planetary mixers are known to provide a suitable bulk circulation and good homogenization for this type of fluid. Besides, owing to their close-clearance nature, their scraping action leads to an efficient transfer of the paste located at the periphery to the vessel bulk.

The three-blade planetary mixer is presented Figure 5-9. It consists of a steel vessel of 50 US gallons (around 200 l), two external scraping arms (twin-blade impeller) and one centered scraping arm (4-blade impeller). The tank has a diameter of 0.53m and a height of 0.24m. The three arms are mounted on a rotating carrousel, which guarantees that the whole volume of the vessel is swept within one single revolution of the carrousel. The lateral surface of the mixer blades is helical thus ensuring good pumping capability.

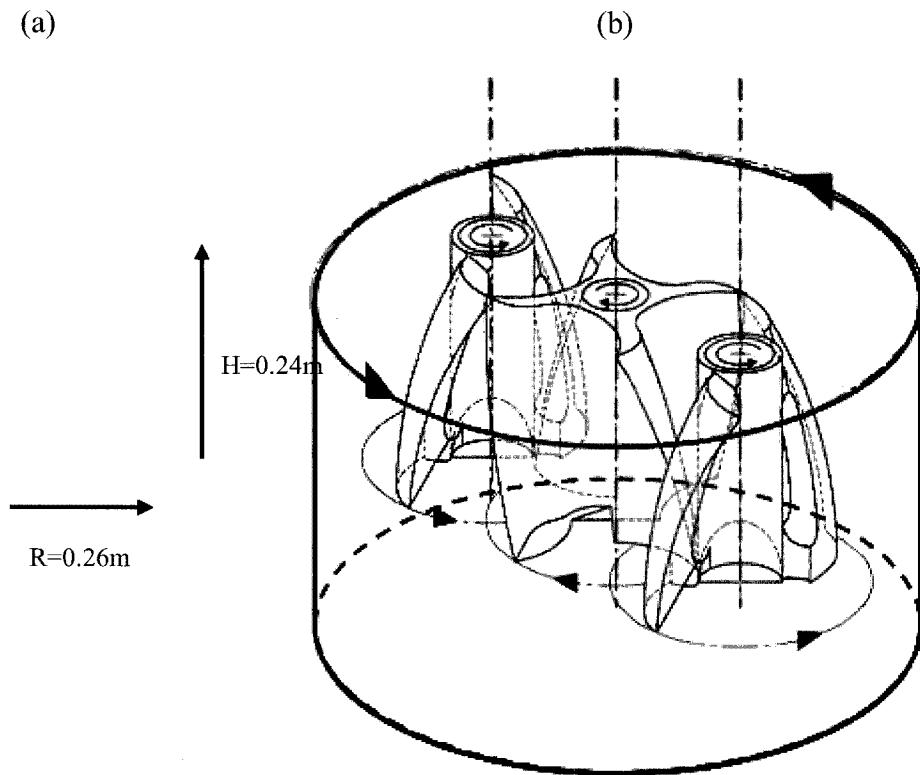


Figure 5-9 - (a) Three-blade planetary mixer with the blades on off-centered shafts and a central wheel shaft (adapted from Kol'man-Ivanov and Shklovskaya, 1966), (b) Motion of the blades

In this work, the two external impellers rotate counter clockwise at 30 rpm. The central impeller rotates clockwise at 15 rpm. The rotational speed of the carrousel is set to 5 rpm. The speed ratios between the external impellers and the central impeller, and between the central impeller and the carrousel are equal to 2 and 3, respectively, which conforms to the design specifications. For the sake of completeness, Figure 5-10 shows a top view of the central impeller and one of the two external impellers.

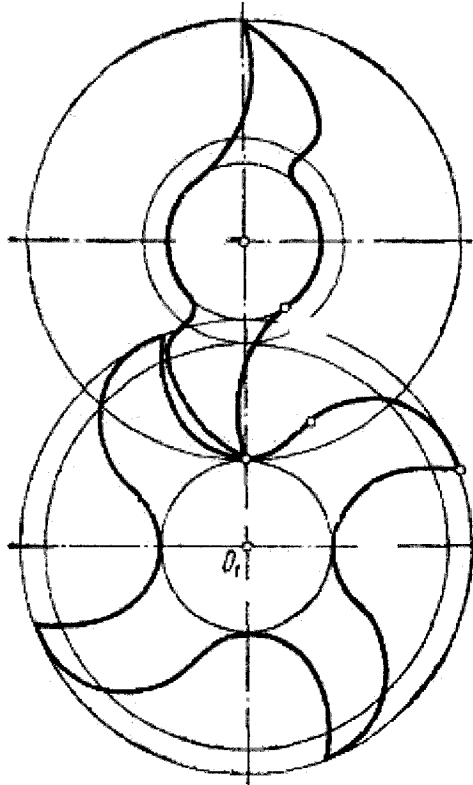


Figure 5-10 – Top view of the central impeller and one of the two external impellers (adapted from Kol'man-Ivanov and Shklovskaya, 1966)

Solid rocket propellants are thermoset composite materials consisting of a ground oxidizer dispersed into a rubbery matrix. Polypropylene glycol (PEG) and hydroxyl-terminated polybutadiene (HTPB) are the most frequent elastomer matrices. The blend is cross-linked by means of a curing agent like hexamethylene diisocyanate (HMDI). Rheological measurements have shown that this type of paste exhibits a slight shear-thinning behaviour so that, in practice, it can be modeled as a Newtonian viscous fluid (Tanguy *et al.*, 1998).

The paste considered in this study has a density ρ of 1800 kg/m³ and a viscosity μ of 400 Pa.s, typical of a propellant at the end of the kneading cycle in a planetary mixer. The flow of such fluid under the operating conditions described in the previous subsection is laminar and is governed by the unsteady Stokes equations.

The results obtained with the MINI-based VFEM and both the coupled and decoupled approaches of Sections 5.2.4.2 and 5.2.4.1 respectively will be compared to those obtained with the P_1^+ - P_0 /VFEM combination of Bertrand et al. (1997) for which the decoupled approach only was used.

The computational domain was discretized into tetrahedra using I-DEAS (EDS). The clearance between the external blades and the vessel wall is very low so that the highest shear rates are expected to occur in these gaps. Consequently, a smaller mesh size was chosen for these regions.

The mesh generated, which is shown in Figure 5-11 - Mesh for the three-blade planetary mixer, contains 169, 882 elements. The corresponding numbers of nodes and equations can be found in Table 5-5 - Characteristics of the meshes generated for the three-blade planetary mixer for both the MINI and the P_1^+ - P_0 elements. All three impellers were taken into account by means of a total of 5, 507 control points. This number was adjusted with respect to the number of finite elements in the static mesh so that the problem is not overconstrained but that the distance between any two control points is small enough to prevent fluid from penetrating into the blades. A time step of 0.6 s was set for the transient simulations. This value ensures that one of the time steps corresponds to the smallest blade/wall gap. The motion of the three blades of the

planetary mixer is symmetric and the flow inside is periodic. All the simulations were performed for a half revolution of the carrousel, which corresponds to 11 time steps.

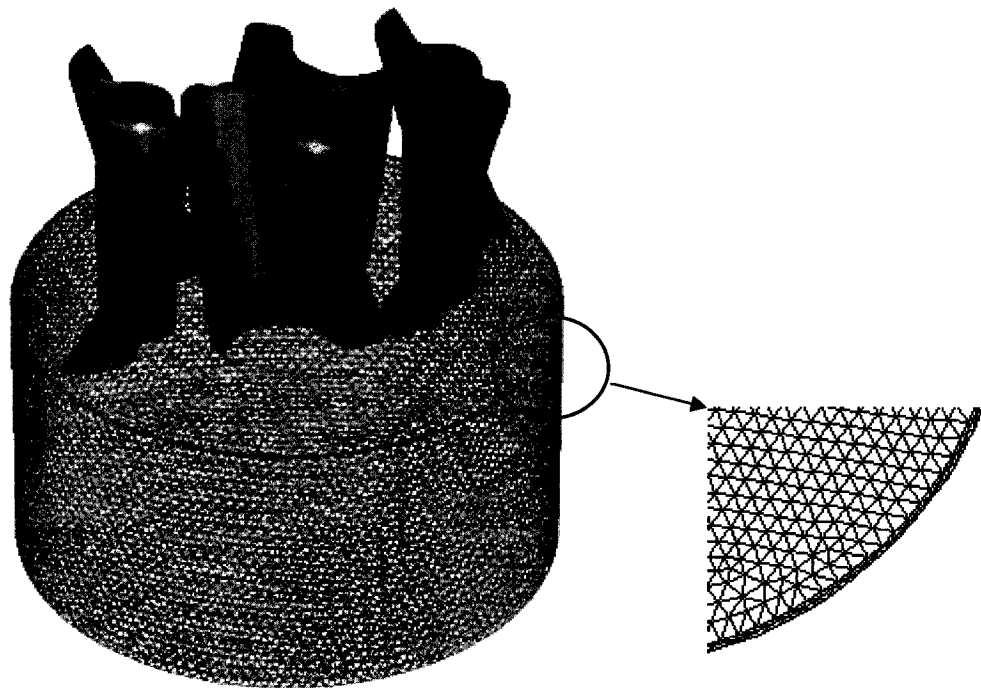


Figure 5-11 - Mesh for the three-blade planetary mixer

Table 5-5 - Characteristics of the meshes generated for the three-blade planetary mixer

Finite element	Number of elements	Number of nodes	Number of equations
$P_1^+ - P_1$ (MINI)	169 882	202 115	0.1 M
$P_1^+ - P_0$	169 882	549 340	1.26 M

Figure 5-12 and Figure 5-14 display respectively the norm of the velocity field at the 3rd and 7th time steps on three different cross-sections, for the MINI and the $P_1^+ - P_0$ elements. These two time steps correspond to positions of the kneading blades where the clearance to the vessel wall is the lowest (3rd) and the highest (7th). Generally speaking, a good agreement can be noticed for these two time steps. In fact, a closer investigation reveals that the MINI element slightly over-estimates with respect to the $P_1^+ - P_0$ element (by around 5%) the maximum of this scalar field. In particular, one may notice, for the MINI element only, the presence of a peak between the central blade and one of the external blades. These figures also show that the three-blade planetary mixer exhibits good scraping capability on all three cross-sections, as evidenced by the higher velocity gradients found in the neighbourhood of the blades and in the area between the external blades and the central blade.

Mid-height

MINI $P_1 - P_0$

Figure 5-13 and

Mid-height

MINI $P_1^+ - P_0$

Figure 5-15 display respectively the axial component of the velocity field (w) of the mixer at the 3rd and 7th time steps on the mid-height cross section. A good agreement between both elements can be noticed although the MINI element seems to predict larger values of the axial component of the velocity in some areas. Due to the high viscosity of the paste, efficient pumping is found in rather small areas located near the impellers. The motion of the helical blades compresses the paste in these zones, which is then pumped upward.

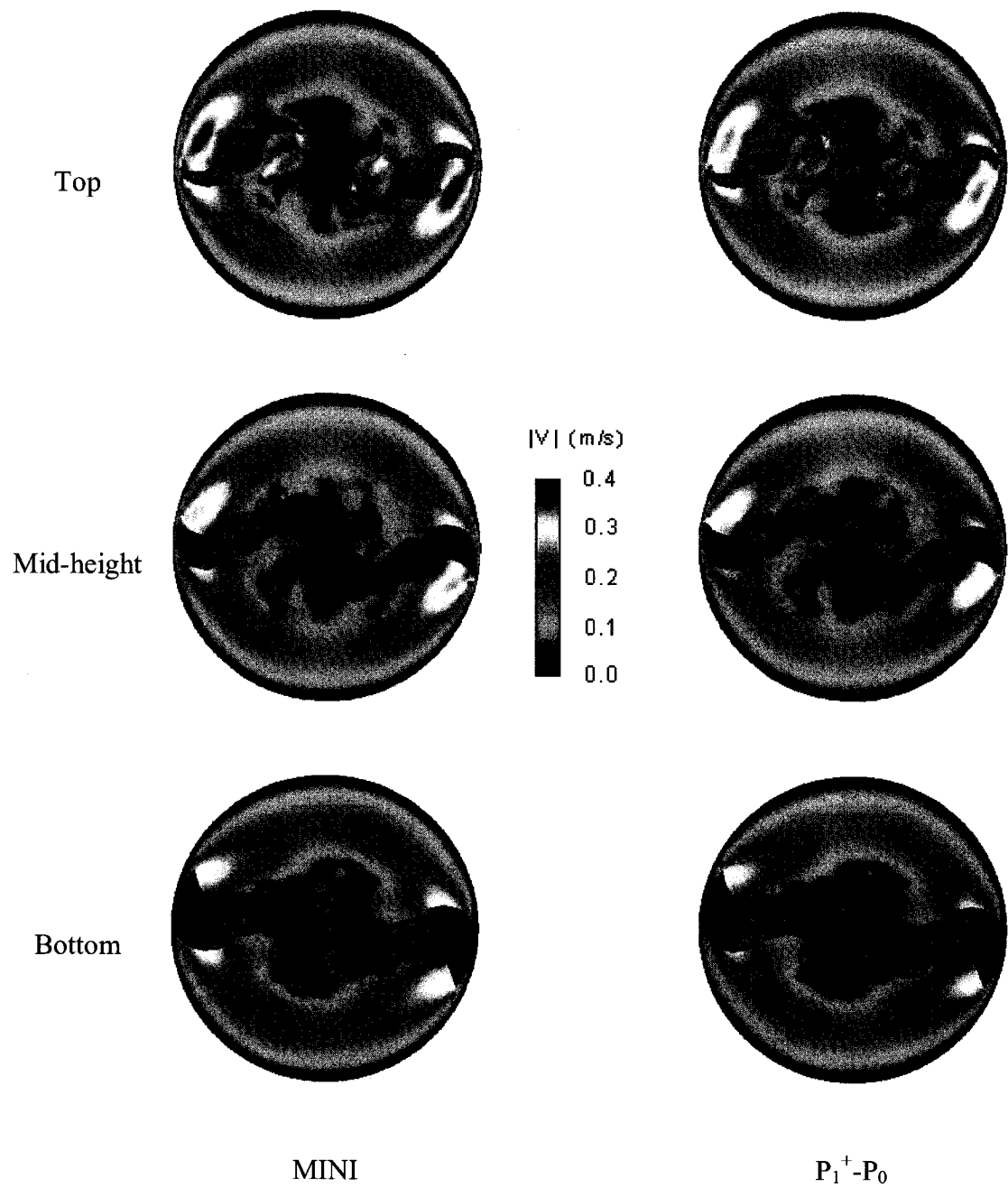


Figure 5-12 - Norm of the velocity field at the 3rd time step in three different cross sections

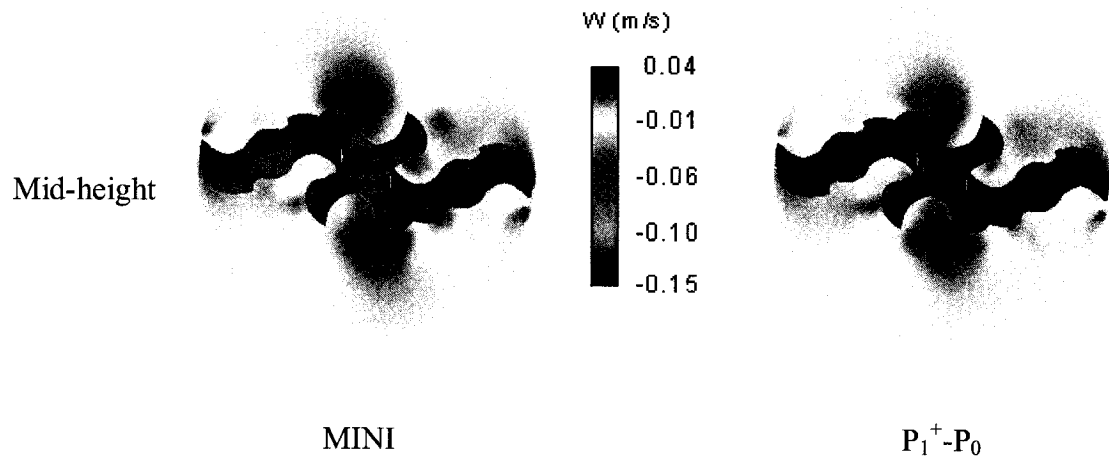


Figure 5-13 – Axial component of the velocity field at the 3rd time step on the mid-height cross section

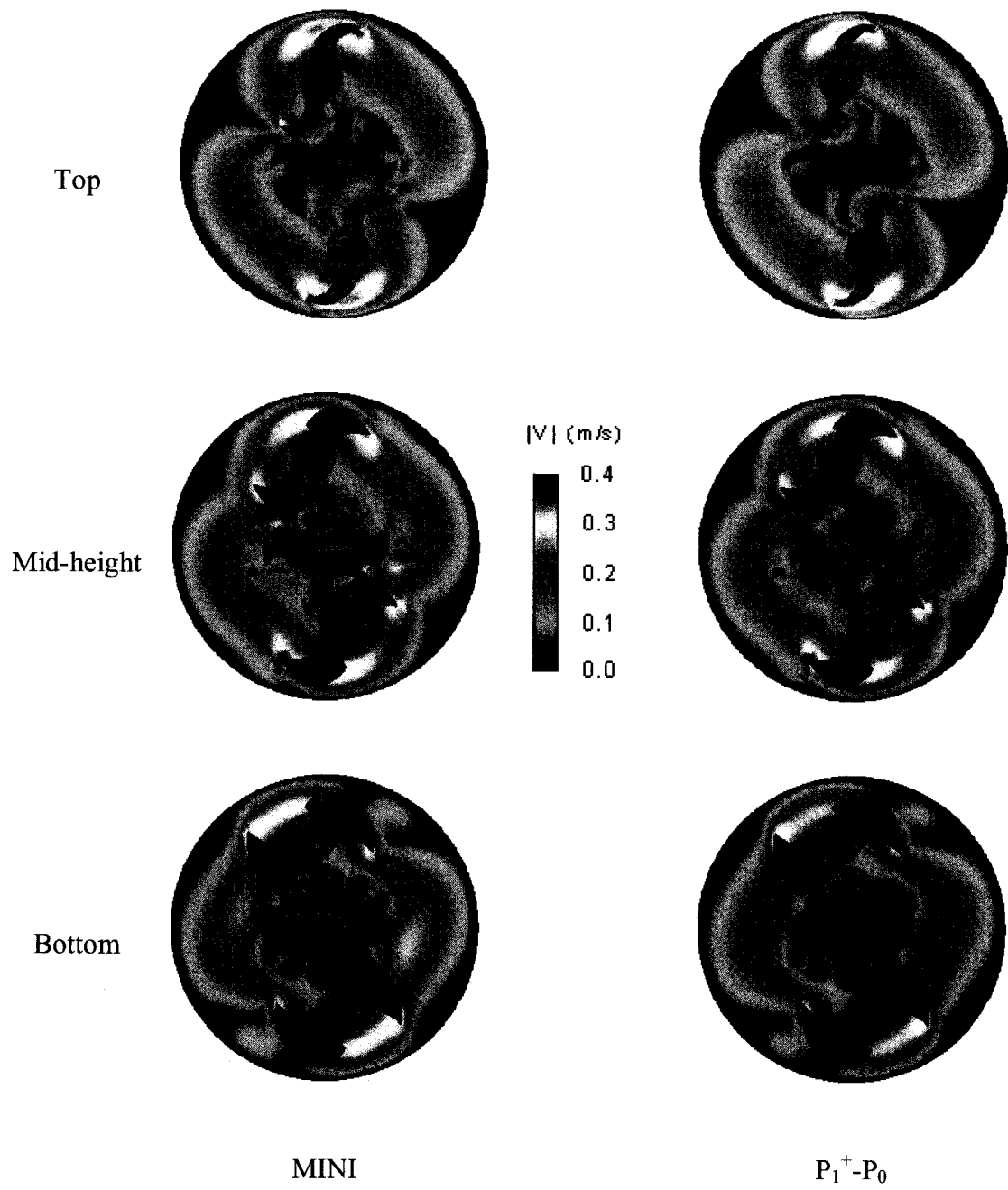


Figure 5-14 - Norm of the velocity field at the 7th time step on three different cross sections

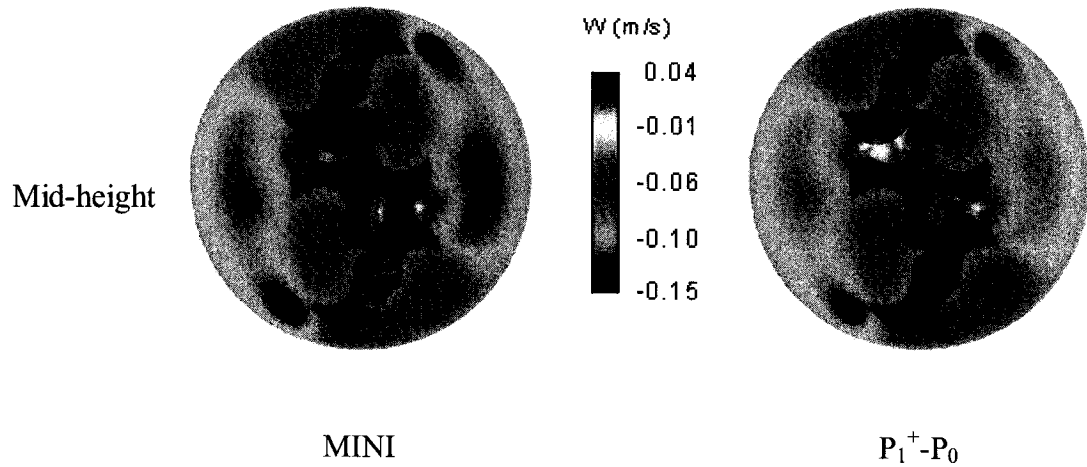


Figure 5-15 - Axial component of the velocity field at the 7th time step on the mid-height cross section

Figure 5-16 and Figure 5-17 show the shear stress (xy-component of the stress tensor) on the mid-height cross section for both elements at the 3rd and 7th time steps, respectively. Here again, a good agreement between the MINI and the $P_1^+-P_0$ elements can be observed. As expected, the maximum shear stress is found where the clearance value with the wall is the lowest. Moreover, the maximum obtained at the 3rd time step is higher than that at the 7th time step, which is due to a smaller blade/wall gap in the former case. This point emphasizes the importance of having a mesh with enough elements in the gap region between the blades and the wall to obtain an accurate solution. A zone of high shear stress can also be noticed in the center of the bulk, more precisely in the clearance between the internal and the external blades.

The power consumption was computed through a macroscopic energy balance. Figure 5-18 shows how the power draw varies over a half period of the carrousel. A particularity of planetary mixers is that the clearance between the blades and the vessel

wall is a periodic function of time. Given that the volume average shear stress is itself a function of the blades-to-wall distance, the power consumption is also time-dependent. One may notice that the power curves obtained with the MINI and the P_1^+ - P_0 elements are very close, with a relative difference smaller than 10%.

The CPU time required for each transient simulation is presented in Table 5-6. It can be seen that the MINI-based VFEM with the coupled approach is 7 times faster than with the decoupled approach, and that this former strategy outperforms the P_1^+ - P_0 /VFEM combination with the decoupled approach by a factor of more than 100!

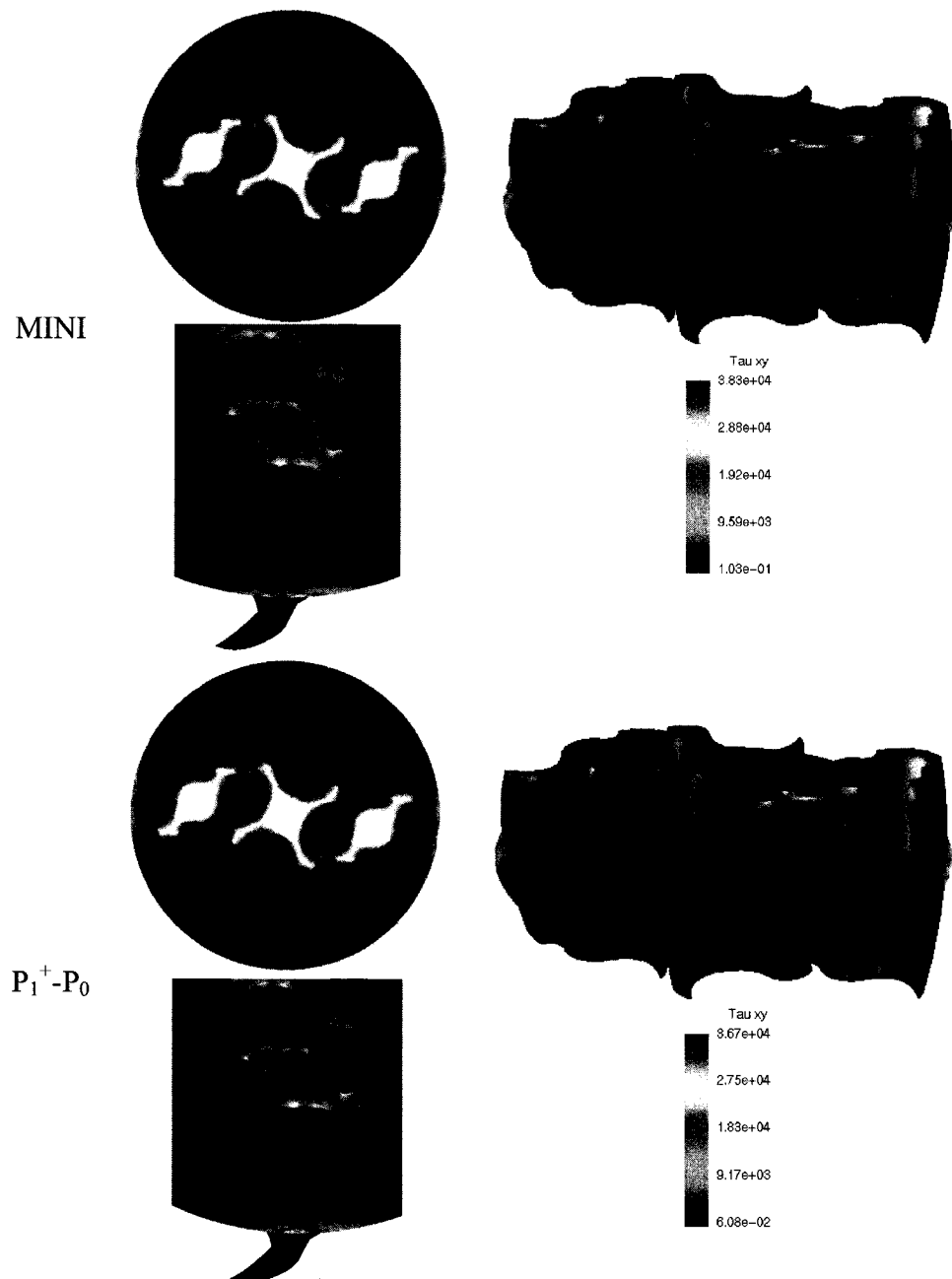


Figure 5-16 – Shear stress on the mid-height cross section after the 3rd time step

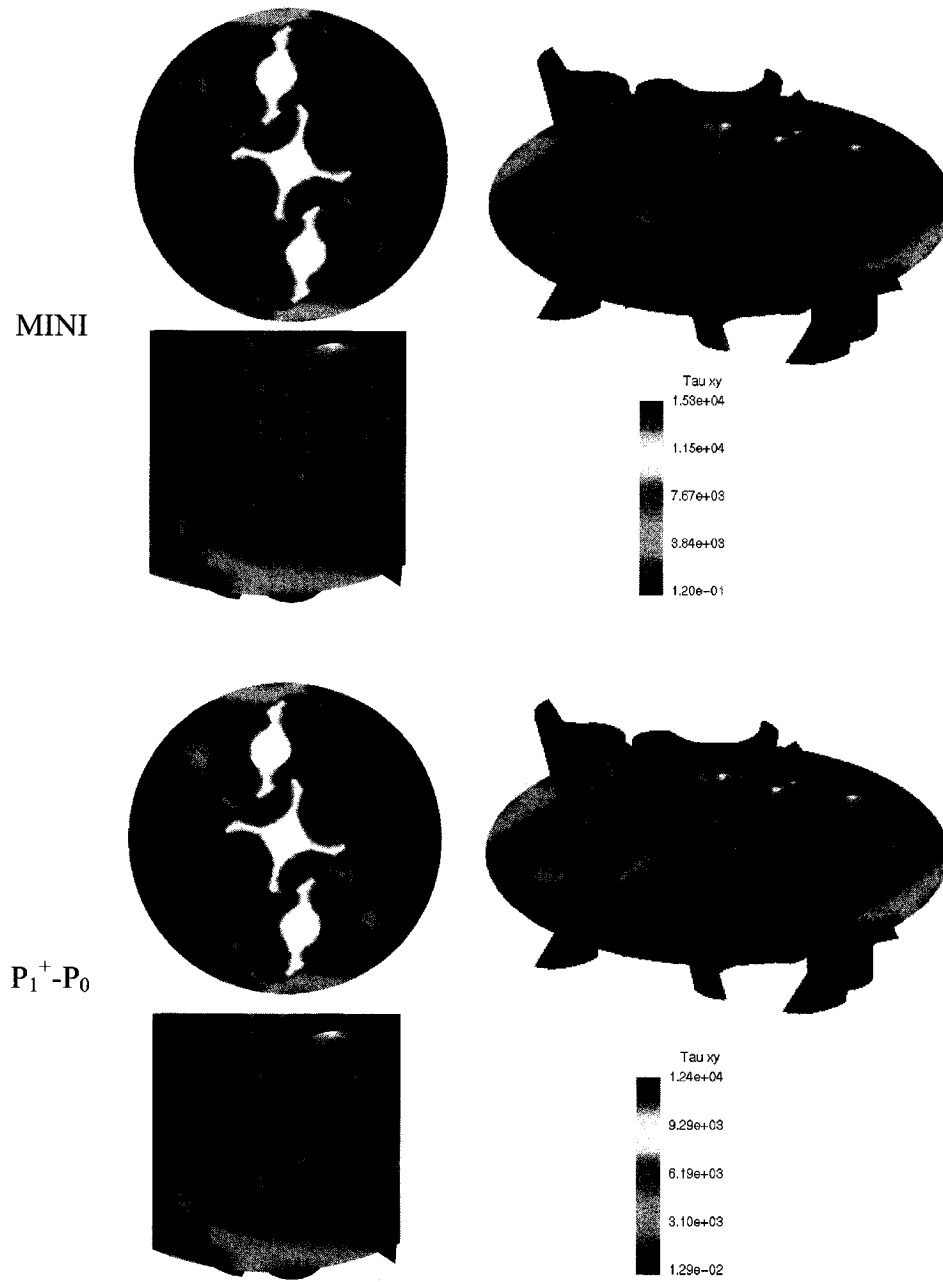


Figure 5-17 - Shear stress on the mid-height cross section after the 7th time step

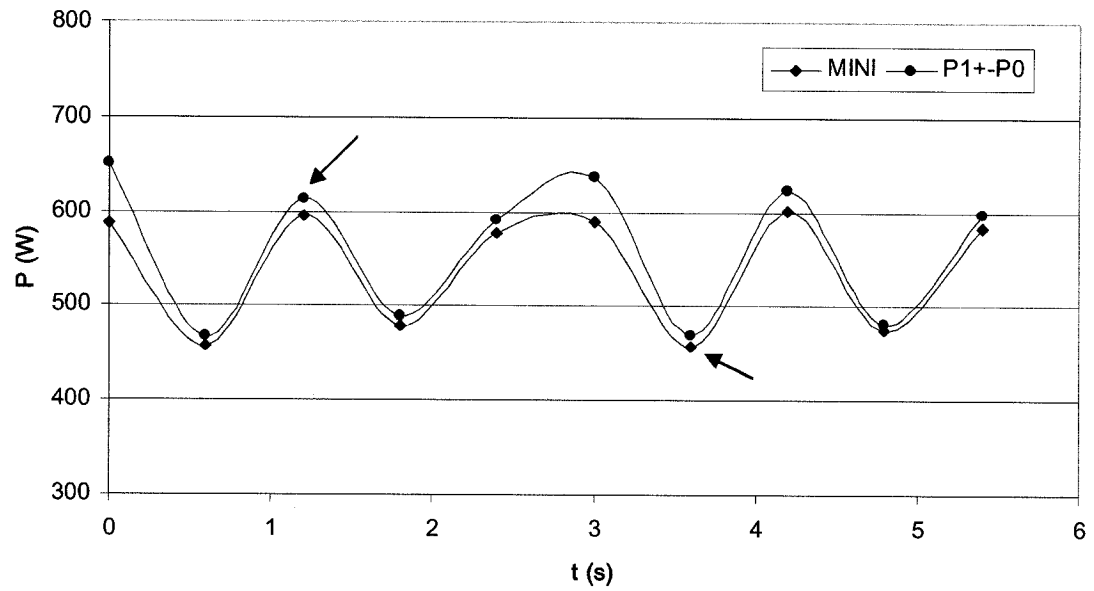


Figure 5-18 - Power consumption of the three-blade planetary mixer

Table 5-6- Average CPU time for the three-blade planetary mixer

Finite element	CPU time
MINI-based VFEM + coupled approach	45 min
MINI-based VFEM + decoupled approach	5h
$P_1^+-P_0$ /VFEM + decoupled approach	3½ days

5.2.8 Conclusions

The objective of this work was to develop a fast three-dimensional numerical strategy for the simulation of viscous fluid flow in complex mixing systems. The method that was introduced is based on the virtual finite element method (VFEM) of Bertrand *et al.* (1997) and the inexpensive MINI finite element. Two methods were also discussed for the solution of the underlying partial differential equations: i) a decoupled approach wherein the velocity and the pressure are solved for in a coupled manner through a penalty technique, and the Lagrange multiplier is obtained as in Bertrand *et al.* (1997) through the Uzawa algorithm, and ii) a coupled approach that solves for the velocity, the pressure and the Lagrange multiplier associated to the kinematics constraints in a fully coupled manner by means of a consistent penalty technique. The precision of the MINI-based VFEM was tested successfully against experimental data in the case of a Maxblend impeller system. A comparison was also made with the $P_1^+-P_0$ /VFEM combination of Bertrand *et al.* (1997). Our new technique was then applied to the simulation of the flow of a Newtonian viscous fluid in a three-blade planetary mixer. The results obtained show that the MINI-based VFEM is a suitable strategy for simulating the flow of viscous fluids in complex mixing systems since its precision is comparable to that obtained with the $P_1^+-P_0$ /VFEM at a fraction of the cost.

Finally, preliminary results (not shown in this paper) in the case of the Maxblend impeller system have revealed that the precision of the MINI-based VFEM tends to decrease when the Reynolds number is increased above 10, outside of the

laminar regime. This may be attributed to the use of penalization and ill-conditioning of the corresponding global matrix (e.g. Pelletier *et al.*, 1989), or to some locking phenomenon, as previously observed in the case of low-order finite elements when a penalty technique is used (e.g. Bercovier, 1978). This will be the topic of a future work.

5.2.9 Acknowledgements

The authors would like to acknowledge the financial contribution of the National Science and Engineering Research Council of Canada (NSERC) and the Fond Québécois de la Recherche sur la Nature et les Technologies (FQRNT).

CHAPITRE 6 RÉSULTATS ADDITIONNELS ET DISCUSSION GÉNÉRALE

Le but de cette partie est d'illustrer les principales difficultés rencontrées lors de la résolution par éléments finis d'un problème de Stokes incompressible par la méthode de la pénalisation en pression. Le problème étudié est choisi pour sa simplicité, mais demeure tout à fait généralisable à des problèmes de type Navier-Stokes classique ainsi qu'aux problèmes de type Navier-Stokes avec contraintes cinématiques.

Comme exposé par Pelletier et coll. (1989), la technique de la pénalisation en pression dans un contexte éléments finis est principalement sujette à deux limitations :

- Le choix du paramètre de pénalisation, ε_p ;
- Le problème des fortes pressions, rencontré notamment lors de la modélisation d'écoulement de fluides très visqueux, typiquement de polymères fondus.

Pour illustrer ces points, l'exemple de l'écoulement d'un fluide très fortement visqueux est étudié. Il s'agit d'une filière utilisée en sécurité automobile pour la production et la mise en forme de propergol destiné à être mis en place dans les dispositifs de coussins gonflables (airbags). Afin d'augmenter son rendement industriel, la filière présentée à la Figure 6-1 fait 0.237m de longueur. L'entrée du convergent a une hauteur de 0.09m et une largeur de 0.164m. La sortie du montage est

composée de quatre canaux. Ceux-ci sont hexagonaux et percés de 19 trous, selon les propriétés énergétiques du matériau exigées. Le rapport entre la largeur de l'entrée du convergent et l'entrefer de deux trous d'un des quatre canaux est estimé à 1%. Afin de modéliser au mieux l'écoulement qui se produit à l'intérieur de cette installation, de nombreuses techniques de maillage ont été nécessaires, notamment en sorties de filières.

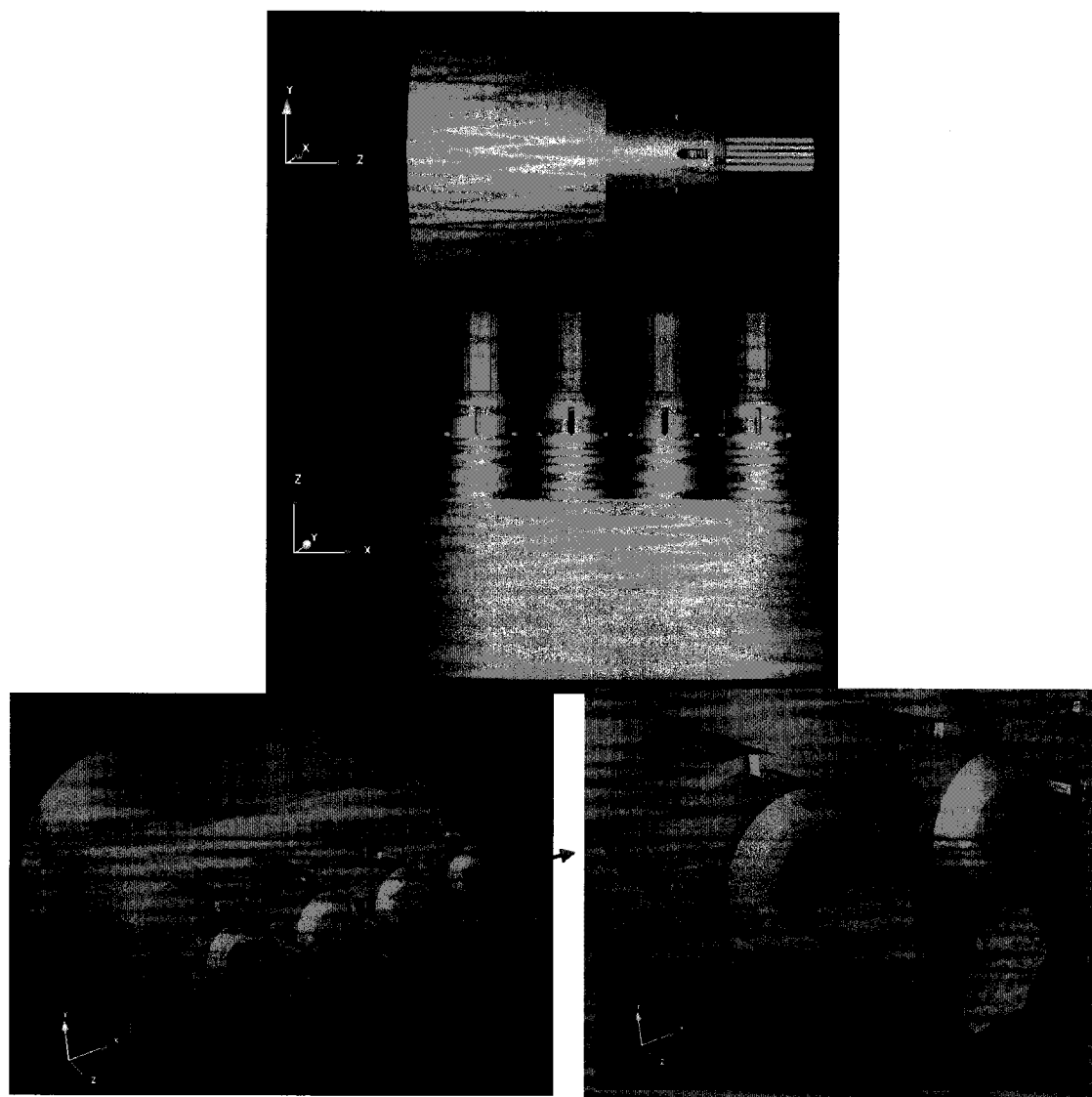


Figure 6-1- Filière à propergol à 4 sorties

Le fluide circulant dans le montage est un propergol de rhéologie newtonienne avec une viscosité μ de 0.87 MPa.s et une masse volumique ρ de 1 750 kg.m⁻³.

Le problème simulé est celui de l'écoulement stationnaire d'un fluide isotherme et incompressible dans une géométrie de type entrée sortie, discrétisée par l'élément fini à pression continue P_1^+ - P_1 (MINI), sous sa forme condensée. Les effets inertiels de l'écoulement sont négligés. L'écoulement est modélisé par un problème de Stokes, dont nous rappelons les équations :

$$-\mu \Delta \mathbf{v} + \mathbf{grad} \, p = \mathbf{f}, \text{ dans } \Omega, \quad [6-1]$$

$$\mathbf{div} \mathbf{v} = 0, \quad \text{dans } \Omega. \quad [6-2]$$

La méthode de la pénalisation par la pression consiste à remplacer [6-2] par :

$$\mathbf{div} \mathbf{v} + \frac{1}{\varepsilon_p} p = 0, \quad \text{dans } \Omega. \quad [6-3]$$

où ε_p est un paramètre de pénalisation très grand. [6-3] montre que la condition de conservation de la masse n'est plus assurée. Il est donc très important de choisir pour ε_p une quantité très grande, de façon à ce que la méthode puisse converger à une précision suffisante. Nous rappelons la formule de ce paramètre, tel que mentionné à la section 4, et proposé par Zienkiewicz et coll. (2005)

$$\varepsilon_p = \frac{10^{-\alpha} h}{\mu}. \quad [6-4]$$

Le fluide étudié ici est très fortement visqueux. D'un point de vue numérique, comme exposé dans Pelletier et coll. (1989), les propriétés du fluide causent un déséquilibre au niveau élémentaire entre les termes liés au gradient de pression et les quantités relatives aux forces de viscosité. Ces écarts entraînent des erreurs d'arrondis qui viennent perturber la solution. Par ailleurs, le déséquilibre trop important entre les termes cités précédemment entraîne une dégradation du conditionnement de la matrice. Sur le cas étudié, cette difficulté fait diverger la solution et aucun calcul n'était possible.

Une solution à ce problème, introduite par Pelletier et coll. (1989), consiste à réduire l'écart entre les termes liés à la pression et ceux liés à la viscosité. Cette technique, discuté à la section 4, consiste à introduire un facteur d'échelle pour la pression p sous la forme suivante :

$$\tilde{p} = \frac{1}{\kappa} p \quad [6-5]$$

où κ est le facteur d'échelle en pression réglé à 10^5 dans le présent travail. D'un point de vue physique, ce point consiste à travailler avec une échelle de pression se rapprochant de celle des bars. Cette stratégie a permis d'obtenir une solution par la méthode de la pénalisation en pression, avec une valeur de α dans [6-4] très petite, fixée à 14. Pour quantifier le terme « petit » souvent retrouvé dans la littérature, une

analyse a été faite sur le cas de la filière à propergol. La conservation du débit et la perte de charge entre l'entrée et les quatre sorties du montage ont été étudiées en faisant varier la quantité α entre 8 et 20. La conservation du débit a été investiguée en calculant une erreur relative entre le débit de matière à l'entrée du convergent et le débit en sortie. La perte de charge a été trouvée en soustrayant la pression en entrée à la pression en sortie. Les données relatives à la simulation sont résumées dans la Table 6-1. Les résultats sont présentés à la Figure 6-2.

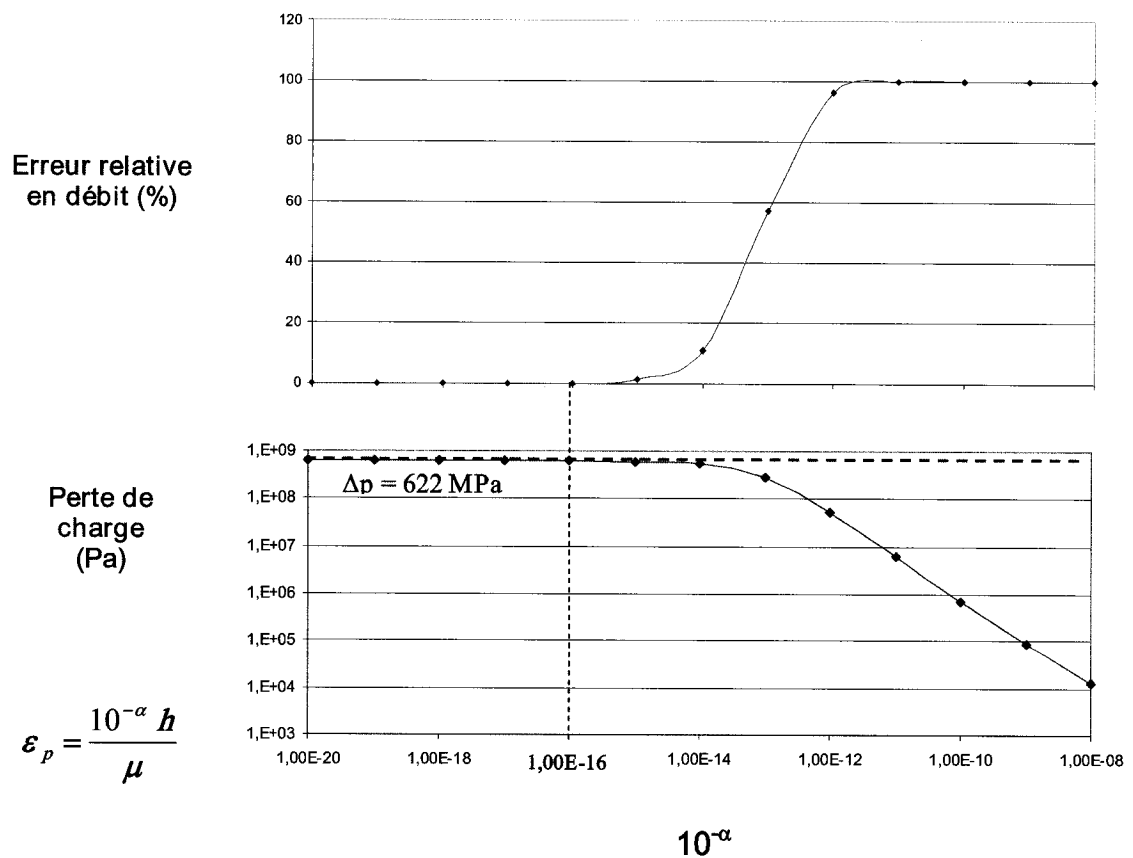


Figure 6-2 - Évolution de l'erreur relative en débit et de la perte de charge en fonction de ε_p

Table 6-1 - Données caractéristiques pour la simulation de l'écoulement en filière

Élément fini	Architecture	Nombre d'éléments	Nombre de noeuds	Nombre d'équations
$P_1^+ - P_1$ (MINI)	AIX (64 bits)	273 172	333 558	0,14 M

Pour des valeurs de α comprises entre 8 et 15, la masse n'est pas conservée. Numériquement, la méthode ne converge pas vers une solution acceptable ou diverge. À partir de la valeur 16, l'erreur relative pour la conservation de la masse est de $10^{-2}\%$ et la perte de charge ne varie plus. Une valeur optimale pour α serait donc 16. En effet, une valeur plus grande empêche la condition d'incompressibilité d'être vérifiée. La Figure 6-3 présente le profil de vitesse à l'intérieur de la filière pour α égal à 16 et 8. Lorsque le paramètre est réglé à 8, un contre écoulement peut être observée et la solution obtenue n'est pas physique. Lorsque α vaut 16, on observe un écoulement à travers les filières avec des pics de vitesse avant l'entrée dans les canaux. À l'inverse, une valeur trop petite entraîne, selon Cheng et coll. (1997), des phénomènes de blocage, de surcontraintes ainsi que des dégradations du conditionnement de la matrice. Ces difficultés n'ont pas été rencontrées ici. Une explication possible serait que l'architecture de l'ordinateur utilisé est de 64 bits. L'exactitude des résultats serait ainsi suffisante pour ne pas entraîner d'erreur d'arrondis, même pour un α avec une valeur à

20. Une solution a été calculée avec α réglé à 16. Les profils de vitesse et de pression sont présentés aux Figure 6-4 et Figure 6-5.

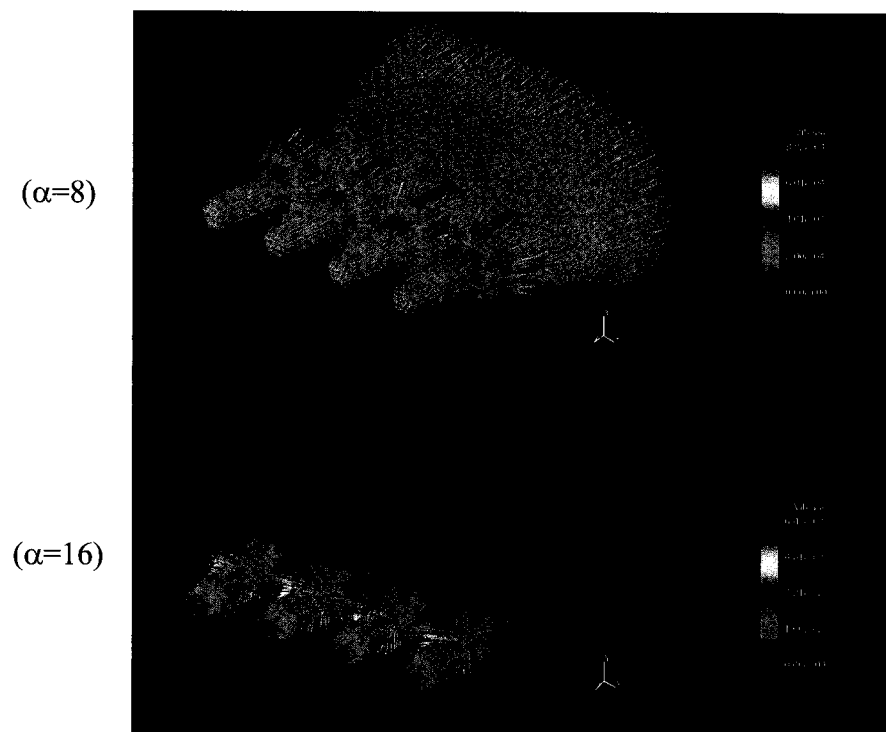


Figure 6-3 - Profil de vitesse dans la filière pour différents α

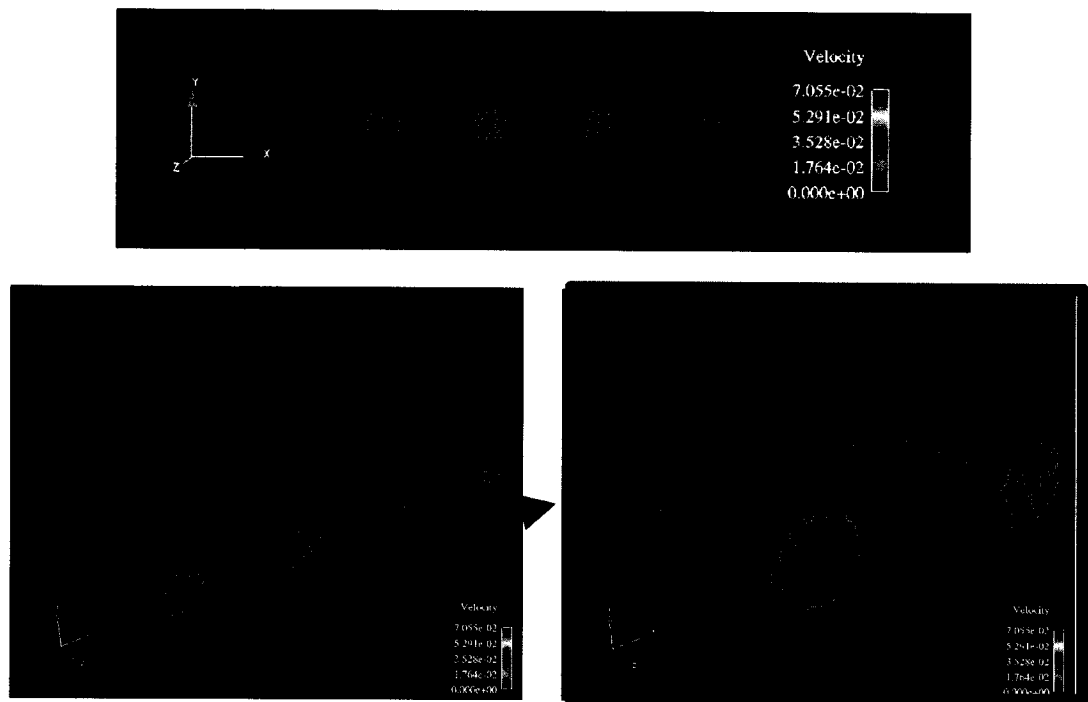


Figure 6-4 - Profil de vitesse pour le montage filière à 4 sorties ($\alpha = 16$)

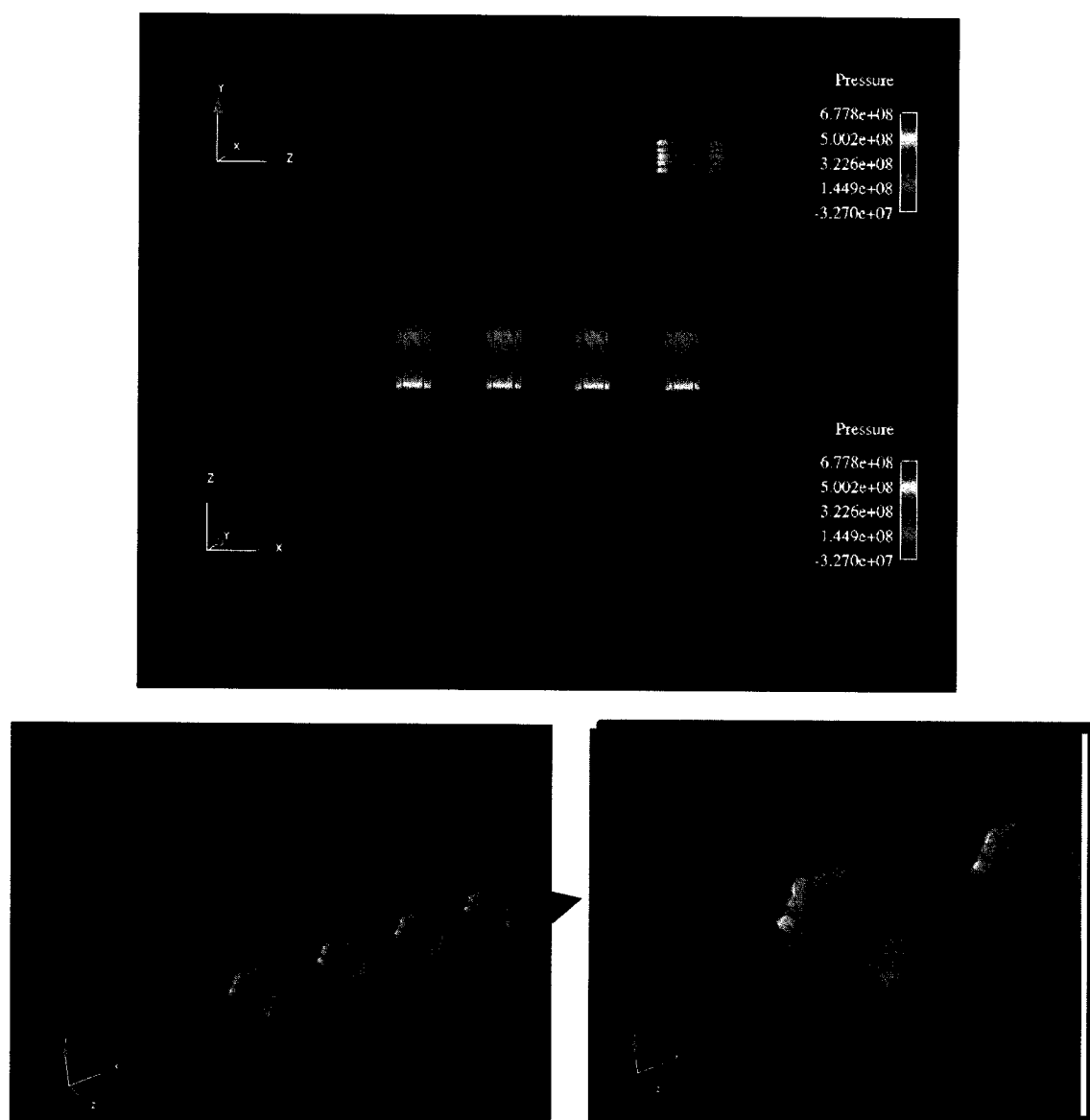


Figure 6-5 - Profil de pression pour le montage filière à 4 sorties ($\alpha = 16$)

CHAPITRE 7 CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS

Cette recherche avait pour objectif de mettre au point une nouvelle stratégie permettant de simuler, par la méthode des éléments finis virtuels, le plus précisément possible, des procédés industriels de mélange, comme la phase de préparation du propergol en mélangeur tripale à mouvement planétaire, dans des délais répondant à des exigences industrielles. Typiquement, il s'agissait de passer d'une durée de calcul de plusieurs jours à des temps en dessous de l'heure, pour une précision quasi-inchangée.

La méthode des éléments finis virtuels permet de réaliser des simulations hydrodynamiques transitoires dans des domaines contenant des objets internes mobiles. Ces derniers sont pris en compte par des contraintes cinématiques qui sont introduites dans les équations d'échange au moyen de multiplicateurs de Lagrange.

L'objectif principal de cette étude a été relevé en deux étapes. Tout d'abord, en implantant l'élément fini $P_1^+-P_1$ (MINI). Ce dernier est linéaire en pression et en vitesse et stabilisé par une bulle placée en son barycentre, qu'il est possible d'éliminer de la résolution par un procédé de condensation statique. Ce dernier point permet, en particulier, de réaliser des gains en temps de calcul considérables. Ensuite, une nouvelle stratégie de résolution pour les problèmes obtenus par la méthode des éléments finis virtuels a été proposée. Dans cette approche, les équations d'échange

sont résolues par une méthode de pénalisation pour la pression et les multiplicateurs de Lagrange. La solution nécessite très peu d'itérations pour converger. Ce dernier point permet d'accélérer les temps de calcul de manière considérable.

Cette méthode a été testée sur trois cas d'étude.

Dans un premier temps, la précision de la méthode a été étudiée à partir des données expérimentales pour le cas du Maxblend sans chicanes. La méthode a ensuite été validée en régime laminaire dans le cas du Maxblend avec chicanes. Au-delà de ce domaine, des difficultés liées au conditionnement de la matrice élémentaire apparaissent et dégradent la solution. Ces faiblesses sont encore à l'étude.

Par la suite, le cas de la filière à quadruple sorties a permis de mettre en évidence l'importance de la valeur du paramètre de pénalisation. Cette quantité contrôle la qualité de la solution et, plus généralement, la convergence de la méthode développée. Elle nécessite une attention toute particulière.

Enfin, le cas industriel du mélangeur tripale à mouvement planétaire a été investigué. L'écoulement du fluide considéré est en régime laminaire profond. La nouvelle stratégie de résolution a été comparée avec celle de Bertrand et coll. (1997). La stratégie présentée ici a permis de réaliser les mêmes calculs en 45min au lieu de 3½

jours avec la méthode de Bertrand et coll. (1997), pour une différence relative en puissance consommée inférieure à 5%.

Cette nouvelle méthode, bien qu'elle nécessite d'être approfondie, en particulier au niveau de l'automatisation du réglage des paramètres de pénalisation, permet de modéliser des problèmes de complexité beaucoup plus élevée dans des délais raisonnables. En particulier, des problèmes de mélange mettant en jeu des entrefers très petits, comme le cas des extrudeuses baxis, des simulations faisant intervenir des surfaces libres ou des modélisations polyphasiques pourraient à l'avenir être envisagés grâce à cette méthode. Enfin, notre méthode ouvre la voie à des techniques de décomposition de domaines en vue de l'étude de procédés entiers de mélange.

RÉFÉRENCES

ALIABADI (S.), TEZDUYAR (T. E.), Stabilized-finite-element/interface-capturing technique for parallel computation of unsteady flows with interfaces, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 190 (2000) 243±261.

AVALOSSE (TH.), CROCHET (M. J.), Finite-element simulation of mixing: 1. Two-dimensional flow in periodic geometry, *AIChE Journal*, v 43, n 3, Mar, 1997, p 577-587.

AVALOSSE (TH.), RUBIN (Y.), FONDIN (L.), Non-Isothermal Modeling of Co-Rotating and Contra-Rotating Twin Screw Extruders, *Journal of REINFORCED PLASTICS AND COMPOSITES*, Vol. 21, No. 5/2002.

BAAIJENS (F. P. T.), A fictitious domain/mortar element method for fluid–structure interaction, *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 2001; 35: 743–761.

BARAILLER (F.), HENICHE (M.), TANGUY (P. A.), CFD analysis of a rotor-stator mixer with viscous fluids, *Chemical Engineering Science* 61 (2006) 2888 – 2894.

BARRIOS (T. P.), GATICA (G. N.), An augmented mixed finite element method with Lagrange multipliers: A priori and a posteriori error analyses, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 200 (2007) 653 – 676.

BELYTSCHKO (T.), KRONGAUZ (Y.), ORGAN (D.), FLEMING (M.), KRYSL (P.), Meshless methods: An overview and recent developments, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 139 (1996) 347.

BERMUDEZ (A.), FERRIN (J. L.), PRIETO (A.), Finite element solution of new displacement/pressure poroelastic models in acoustics, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 195 (2006) 1914–1932.

BERTRAND (F.), THIBAUT (F.), TANGUY (P. A.), CHOPLIN (L.), Process Mixing - Chemical and Biochemical Applications, G. Tatterson and R. Calabrese (Eds) *AIChE Symp Series No. 299*: 106, 1994.

BERTRAND (F.), TANGUY (P. A.), THIBAUT (F.), A three-dimensional fictitious method for incompressible fluid flow problems, *INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS*, VOL. 25, 719±736 (1997).

BERTRAND (F.), TANGUY (P. A.), BRITO DE LA FUENTE (E.), CARREAU (P.), Numerical modeling of the mixing flow of second-order fluids with helical ribbon impellers, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 180 (1999) 267±280.

BERTRAND (F.), THIBAUT (F.), DELAMARE (L.), TANGUY (P. A.), Adaptive finite element simulations of fluid flow in twin-screw extruders, *Computers and Chemical Engineering*, v 27, n 4, Apr 15, 2003, p 491-500.

BRAESS (H.), WRIGGERS (P.), Arbitrary Lagrangian Eulerian finite element analysis of free surface flow, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 190 (2000) 95±109.

CLIFFORD (M. J.), COX (S. M.), FINN (M. D.), Reynolds number effects in a simple planetary mixer, *Chemical Engineering Science* 59 (2004) 3371 – 3379.

COMMEND (S.), TRUTY (A.), ZIMMERMANN (T.), Stabilized finite elements applied to elastoplasticity: I. Mixed displacement–pressure formulation, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 193 (2004) 3559–3586.

CONNELLY (R. K.), KOKINI (J. L.), Mixing Simulation of a Viscous Newtonian Liquid in a Twin Sigma Blade Mixer, *AIChE Journal* October 2006 Vol. 52, No. 10.

COULSON (J. M.), RICHARDSON (J. F.), BACKHURST (J. R.), HARKER (J. H.), Chemical Engineering, Volume 1, 4th edition, Pergamon Press, New-York, 1993.

DELAPLACE (G.), GUÉRIN (R.), LEULIET (J. C.), Dimensional analysis for planetary mixer: Modified power and Reynolds numbers, AIChE Journal, December 2005 Vol. 51, No. 12.

DELAPLACE (G.), THAKUR (R. K.), BOUVIER (L.), ANDRÉ (C.), TORREZ (C.), Dimensional analysis for planetary mixer: Mixing time and Reynolds numbers, Chemical Engineering Science 62 (2007) 1442 – 1447.

DE LA VILLÉON (J.), BERTRAND (F.), TANGUY (P. A.), LABRIE (R.), BOUSQUET (J.), LEBOUVIER (D.), Numerical investigation of mixing efficiency of helical ribbons, AIChE Journal, April 1998 Vol. 44, No. 4.

DEVALS (C.), HENICHE (M.), TANGUY (P. A.), TAKENAKA (K.), A detailed analysis of the Maxblend impeller hydrodynamics with Newtonian and shear thinning fluids, *à paraître*.

ENGELMAN (M. S.), SANI (R. L.), GRESHO (P. M.), BERCOVIER (M.), Consistent vs. reduced integration penalty methods for incompressible media using several old and

new elements, INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, VOL. 2, 25±42 (1982).

FADLUN (E. A.), VERZICCO (R.), ORLANDI (P.), MOHD-YUSOF (J.), Combined immersed-boundary methods for three dimensional complex flow simulations. J Comp Phys 2000;161:30.

FRADETTE (L.), THOMÉ (G.), Tanguy (P. A.), TAKENAKA (K.), Power and mixing time study involving a Maxblend impeller with viscous Newtonian and non-Newtonian fluids. Submitted to *Chemical Engineering Research and Design* 2007; in review.

FRANCA (L. P.), NESLITURK (A.), On a two-level element method for the incompressible Navier-Stokes equations, *Int. J. Numer. Meth. Engng* 2001; 52:433–453.

FRIES (T.), MATTHIES (H. G.), A stabilized and coupled meshfree/meshbased method for the incompressible Navier–Stokes equations—Part II: Coupling, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 195 (2006) 6191–6204.

FRIES (T.), MATTHIES (H. G.), A stabilized and coupled meshfree/meshbased method for the incompressible Navier–Stokes equations—Part II: Stabilization, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 195 (2006) 6205–6224.

GLOWINSKI (R.), PAN (T.), PÉRIAUX (J.), Numerical simulation of a multi-store separation phenomenon: A fictitious domain approach, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 195 (2006) 5566–5581.

GODFREY (J. C.), *Mixing of High-Viscosity Fluids, in Mixing in the Process Industries*, N. Harnby, M. F. Edwards, and A. W. Nienow, eds., Butterworths, London, 1986.

GOGATE (P.R.), BEENACKERS (A.), PANDIT (A.B.). - Multiple-impeller systems with a special emphasis on bioreactors: a critical review, *Biochemical Engineering*, pp 109-144 (2006).

GOLDSTEIN (D.), HANDLER (R.), SIROVICH (L.), Modeling a no-slip flow boundary with an external force field, *JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS* 105, 354, 366 (1993).

GONZÁLES (D.), CUETO (E.), DOBLARÉ (M.), Volumetric locking in natural neighbour Galerkin methods, *Int. J. Numer. Meth. Engng* 2004; 61:611–632.

HALL (K. R.), GODFREY (J. C.), *The mixing rates of highly viscous newtonian and non-newtonian fluids in a laboratory sigma-blade mixer*, *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, 46, 205-213, 1968.

HARTMANN (H.), DERKSEN (J. J.), Van Den AKKER (H. E. A.), Numerical simulation of a dissolution process in a stirred tank reactor, *Chemical Engineering Science* 61 (2006) 3025 – 3032.

HOLLAND (F. A.), CHAPMAN (F. S.), Liquid mixing and processing in stirred tanks, Reinhold Pub. Co., New-York, 1966.

IRANSHAHI (I.), HENICHE (M.), BERTRAND (F.), TANGUY (P. A.), Numerical investigation of the mixing efficiency of the Ekato Paravisc impeller, *Chemical Engineering Science* 61 (2006) 2609 – 2617.

IRANSHAHI (I.), HENICHE (M.), BERTRAND (F.), TANGUY (P. A.), Numerical investigation of the mixing efficiency of the Ekato Paravisc impeller, *Chemical Engineering Science* 61 (2006) 2609 – 2617.

JONGEN (T.), Characterization of Batch Mixers Using Numerical Flow Simulations, *AIChE Journal*, November 2000 Vol. 46, No. 11.

JONGEN (T.), BRUSCHKE (M. V.), DEKKER (J. G.), Analysis of dough kneaders using numerical flow simulations, *Cer Chem.* 2003;80(4):383-389..

KIM (S.-W.), TURNG (L.-S.), Three-dimensional numerical simulation of injection molding filling of optical lens and multiscale geometry sing finite element method, *POLYMER ENGINEERING AND SCIENCE*—2006.

KOL'MAN-IVANOV (É. É.), SHKLOVSKAYA (R.), Geometric design of planetary mixers where the blades clean one another, *Neftyanoe Machinosttoenie*, No. 8,, pp. 14-20, March, 1966.

LAI (M. C.), PESKIN (C. S.), An immersed boundary method with formal second order accuracy and reduced numerical viscosity. *J Comp Phys* 2000;160:705.

LANGTANGEN (H. P.), MARDAL (K.), WINTHER (R.), Numerical methods for incompressible viscous flow, *Advances in Water Resources* 25 (2002) 1125–1146.

LE (D. V.), KHOO (B. C.), PERAIRE (J.), An immersed interface method for the incompressible Navier–Stokes equations in irregular domains. *Proceedings of the third MIT conference on computational fluid and solid mechanics*, 710. Elsevier Science; 2005.

LEVEQUE (R. J.), LI (Z.), The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources, *SIAM J. Numer. Anal.*, 31, 1019±1044 1994.

LI (Z.), LAI (M.-C.), The immersed interface method for the Navier–Stokes equations with singular forces. *J Comp Phys* 2001;171:822.

MOURAD (H. M.), DOLBOW (J.), HARARI (I.), A bubble-stabilized finite element method for Dirichlet constraints on embedded interfaces, *Int. J. Numer. Meth. Engng* 2007; 69:772–793.

N'DRI (D.), GARON (A.), FORTIN (A.), Incompressible Navier-Stokes computations with stable and stabilized space-time formulations: a comparative study, *Commun. Numer. Meth. Engng* 2002; 18:495–512.

N'DRI (D.), GARON (A.), FARINAS (M.I.), URQUIZA (J.), Low-order bubble-type stabilization, *Commun. Numer. Meth. Engng* 2006; 22:753–765.

NORBURN (S.), SILVESTER (D.), Stabilised vs. stable mixed methods for incompressible flow, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 166 (1998) 131-141.

OTTINO (J. M.), *The kinematics of mixing*, Cambridge University Press, Cambridge, 1989.

PACCINI (A.), Développement d'un modèle éléments finis 3D appliqué à la simulation d'opérations chirurgicales des tissus mous, *Thesis*.

PELLETIER (D.), FORTIN (A.), CAMARERO (R.), Are FEM solutions of incompressible flows really incompressible? (Or how simple flows can cause headaches!), INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, VOL. 9, 99±112 (1989).

PESKIN (C. S.), MCQUEEN (D. M.), A three-dimensional computational method for blood flow in the heart: I. Immersed elastic fibers in a viscous incompressible fluid, J. Comput. Phys., 81, 372±405 (1989).

PICHELIN (E.), COUPEZ (T.), Finite element solution of the 3D mold filling problem for viscous incompressible fluid, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 163 (1998) 359-371.

PERNG (C. Y.), MURTHY (J.), A moving mesh technique for the simulation of flow in mixing tanks, Proc. AIChE Ann. Meet., Miami Beach, FL, AIChE, 1992.

RAI (M. M.), Navier-Stokes simulations of rotor-stator interaction using patched and overlaid grids, AIAA Paper 85-1519, 1985.

RAMIÈRE (I.), ANGOT (P.), BELLIARD (M.), A fictitious domain approach with spread interface for elliptic problems with general boundary conditions, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 196 (2007) 766–781.

RAUT (J. S.), NAIK (V. M.), JONGEN (T. R.), Efficient Simulation of Time-Dependent Flows: Application to a Twin Screw Extruder, *AIChE Journal* August 2003 Vol. 49, No. 8.

REDDY (J. N.), On penalty function methods in the finite-element analysis of flow problems, *INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS*, VOL. 2, 151±171 (1982).

RIVERA (C.), HENICHE (M.), ASCANIO (G.), TANGUY (P. A.), A virtual finite element model for centered and eccentric mixer configurations, *Computers and Chemical Engineering* 28 (2004) 2459–2468.

RIVERA (C.), FOUCAULT (S.), HENICHE (M.), ESPINOSA-SOLARES (T.), TANGUY (P.A.), Mixing analysis in a coaxial mixer, *Chemical Engineering Science* 61 (2006) 2895 – 2907.

SHEEHY (P.), TANGUY (P. A.), BLOUIN (D.), Finite element model for complex profile calibration, *Polym. Eng. Sci.*, 34, 650± 655 (1994).

SHETH (K. S.), POZRIKIDIS (C.), Effects of inertia on the deformation of liquid drops in simple shear flow, *Computers & Fluids Vol. 24, No. 2, pp. 101-119, 1995.*

SU (S.), LAI (M.), LIN (C.), An immersed boundary technique for simulating complex flows with rigid boundary, *Computers & Fluids 36 (2007) 313–324.*

TANGUY (P. A.), LACROIX (R.), BERTRAND (F.), CHOPLIN (L.), BRITO-DE-LA-FUENTE (E.), Finite element analysis of viscous mixing in a helical ribbon screw impeller, *AIChE J.*, 38, 939, 1992.

TANGUY (P. A.), BERTRAND (F.), LABRIE (R.), BRITO-DE-LA-FUENTE (E.), FAGES (M. H.), *Recents Progres en Genie des Procedes*, (Lavoisier TecDoc) 38, 87, 1995

TANGUY (P. A.), BERTRAND (F.), LABRIE (R.), BRITO-DE-LA-FUENTE (E.), Numerical modelling of the mixing of viscoplastic slurries in a twin-blade planetary mixer, *Chem Eng Res Des*, 74: 499, 1996.

TANGUY (P. A.), BERTRAND (F.), THIBAUT (F.), FAGES (F.), LAMOTTE (M.), GIRAUD (E.), FAGES (M. H.), Mécanismes de malaxage dans un malaxeur bipale à

mouvement planétaire : simulation numérique 3D et étude expérimentale par traçage fluorométrique, *Récents progrès en génie des procédés* 61, 43-48.

TANGUY (P. A.), THIBAUT (F.), DUBOIS (C.), AÏT-KADI (A.), MIXING HYDRODYNAMICS IN A DOUBLE PLANETARY MIXER, *Trans IChemE*, Vol 77, Part A, June 1999.

TEZDUYAR (T. E.), OSAWA (Y.), Finite element stabilization parameters computed from element matrices and vectors, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 190 (2000) 411±430.

THOMPSON (J. F.), THAMES (F. C.), MASTIN (C. W.), Automatic generation of body-fitted curvilinear coordinate system for field containing any number of arbitrary two-dimensional bodies, *J. Comp. Phys.* 15, 299-319, 1974.

THOMPSON (J. F.), WARSI (Z. U. A.), MASTIN (C. W.), Numerical grid generation, formulation and applications, North-Holland, Amsterdam, 1985.

TSENG (Y. H.), FERZIGER (J. H.), A ghost-cell immersed boundary method for flow in complex geometry. *J Comp Phys* 2003;192:593.

URQUIZA (S. A.), BLANCO (P. J.), VÉNERE (M. J.), FEIJOO (R. A.), Multidimensional modelling for the carotid artery blood flow, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 195 (2006) 4002–4017.

VAN LOON (R.), ANDERSON (P. D.), DE HART (J.), BAAIJENS (F. P. T.), A combined fictitious domain/adaptative meshing method for fluid-structure interaction in heart valves, *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 2004; 46:533–544.

WANG (X.), LIU (W.), Extended immersed boundary method using FEM and RKPM, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 193 (2004) 1305–1321.

XIA (K.), YAO (H.), A Galerkin/least-square finite element formulation for nearly incompressible elasticity/stokes flow, *Applied Mathematical Modelling* 31 (2007) 513–529.

ZHANG (L.), GERSTENBERGER (A.), WANG (X.), LIU (W.), Immersed finite element method, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 193 (2004) 2051–2067.

ZHOU (G.), TANGUY (P. A.), DUBOIS (C.), Power consumption in a double planetary mixer with non-newtonian and viscoelastic materials, *Trans IChemE*, Vol 78, Part A, April 2000.